

ORSAY
Série A
N° d'ordre
882

T H E S E

présentée

A L'UNIVERSITE DE PARIS-SUD

Centre d'Orsay

pour obtenir

le grade de Docteur ès Sciences Physiques

par

Jacques PERRIER

Thèse : Contribution à l'étude de l'effet Kondo

Soutenue le 20 décembre 1971 devant la Commission d'Examen.

MM. J. FRIEDEL	Président
A. BLANDIN	Examineur
R. BALIAN	"
H. SUHL	"

ORSAY
Série A
N° d'ordre
882

T H E S E

présentée

A L'UNIVERSITE DE PARIS-SUD

Centre d'Orsay

pour obtenir

le grade de Docteur ès Sciences Physiques

par

Jacques PERRIER

Thèse : Contribution à l'étude de l'effet Kondo

Soutenue le 20 décembre 1971 devant la Commission d'Examen.

MM. J. FRIEDEL	Président
A. BLANDIN	Examineur
R. BALIAN	"
H. SUHL	"



A mon père

Remerciements.

Je suis très reconnaissant à l'Administration de l'Equipement de m'avoir permis d'effectuer ce travail, grâce au "Décret Suquet". Je me permets de personnaliser cette reconnaissance en remerciant Monsieur l'Inspecteur Général des Ponts et Chaussées André Brunot, qui était directeur de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées lorsque j'y étais élève et qui accueillit ma demande de Décret Suquet avec sa bienveillance habituelle.

Ma deuxième chance a été de travailler au Laboratoire de Physique des Solides de la Faculté des Sciences d'Orsay, dirigé par les Professeurs A. Blandin et J. Friedel. L'esprit de camaraderie qui y règne a grandement facilité ma formation. Outre les Professeurs Blandin et Friedel, je remercie tous mes camarades d'Orsay et en particulier les Docteurs S. Barišić, B. Coqblin, H. Launois, P. Lederer, M. T. Monod et G. Toulouse.

Enfin, dans la dernière phase de mon travail, Monsieur l'Ingénieur des Mines R. Balian accepta la lourde tâche de me maintenir dans le droit chemin et eut fréquemment à intervenir. Je lui en suis particulièrement reconnaissant.

Je remercie enfin Mesdames F. Kakou et H. Thaissen, qui ont assuré la frappe et le tirage du manuscrit et dont le dévouement a permis de respecter les délais, malgré la surcharge de fin d'année.

TABLE DES MATIERES

Chapitre I : Généralités sur l'effet Kondo et contenu de la thèse	1
- Principales approches théoriques	2
- Contenu de la thèse	6
Chapitre II : Relation entre l'approche diagrammatique et le découplage de Nagaoka	9
- Origine des divergences	11
- Définition du parquet	13
- Notation abrégée	15
- Méthode de comparaison	19
- Relation avec le découplage de Nagaoka	23
Chapitre III : Absence de renormalisation pour les propagateurs virtuels	26
- Introduction	26
- Méthode de Balian, Bloch et de Dominicis	32
. Diagrammes de $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$	35
. Diagramme de $\langle \theta \rangle$	41
- Non renormalisation de la ligne virtuelle	46
. Diffusion normale	47
. Diffusion de Kondo	49
Chapitre IV : Approximation d'invariance par translation	54
- Diffusion normale	54
. Diagrammes sans boucles	54
. Diagrammes avec boucles	57
- Diffusion de Kondo	58
. Définition de θ^1	59
. Diagrammes sans boucles	59
. Diagrammes avec boucles	64
. Remarques sur l'équation obtenue	66

ANNEXES

Annexe 1 : La méthode d'Abrikosov ; son équivalence avec la méthode B. B. D.	70
Annexe 2 : Elimination partielle des boucles électroniques dans la matrice T	77
Annexe 3 : Calcul de T_{boucle}^4	89
Annexe 4 : Conditions aux limites et parité	92
Références	97

C H A P I T R E I

GENERALITES SUR L'EFFET KONDO ET CONTENU DE LA THESE

Dans ce premier chapitre, en guise d'introduction, nous commençons par rappeler brièvement en quoi consiste l'effet Kondo et quelles sont les principales approches du problème. Ceci nous permettra ensuite, dans la deuxième partie du chapitre, de situer notre propre "contribution à l'étude de l'effet Kondo" dans le contexte général.

1 - Qu'est ce que l'effet Kondo ?

L'effet Kondo est connu depuis longtemps : il s'agit du phénomène du "minimum de résistivité" qui semble avoir été observé pour la première fois par Meissner et Voigt⁽¹⁾ en 1930. Il a été rebaptisé par l'usage "Effet Kondo" après que Kondo⁽²⁾ ait clairement montré l'origine du phénomène en 1964. Le travail de Kondo a été facilité par les progrès de la métallurgie, qui avaient permis de conclure que l'effet était lié à la présence d'impuretés magnétiques dans une matrice normale (alliages du type CuFe) et que c'était un effet à une impureté (c'est à dire qu'il n'a pas pour origine les interactions entre impuretés magnétiques). Kondo est donc parti de l'interaction d'échange s-d entre les électrons s de la matrice et les électrons d de l'impureté, qu'on peut écrire d'une façon approchée : $H_{int} = -2J \vec{s} \vec{S}$. Il a montré que cette interaction conduisait à la fameuse divergence en $J^3 \log T$ pour la résistivité d'impureté qui s'écrit au troisième ordre en J : $\rho_i = \rho_i^0 (1 + 4J\rho \log \frac{T}{D})$ où D est la largeur de la bande, ρ la densité d'état et ρ_i^0 la résistivité d'impureté au deuxième ordre en J. Cette forme explique bien le phénomène de minimum de résistivité, à condition de supposer que J ait une valeur négative. Cette valeur négative de J est heureusement expliquée par la théorie des états liés virtuels de Friedel-Blandin⁽³⁾ et également par la transformation de Schrieffer-Wolff⁽⁴⁾ appliquée à l'Hamiltonien d'Anderson (voir en particulier B. Coqblin et C. F. Ratto⁽⁵⁾). Cependant, le résultat de Kondo, s'il a le mérite de placer le problème dans son véritable contexte, montre bien qu'on ne peut pas en rester là :

la formule obtenue est valable à haute température, mais pas à basse température, à cause de la divergence en $\log T$. Il est vite apparu⁽⁶⁾ que Kondo avait calculé le premier de toute une série de termes divergents et qu'il faudrait en principe les calculer tous pour avoir le comportement du système à basse température. Cette situation fait que l'effet Kondo, à l'origine expérimental, est devenu un problème presque purement mathématique, pour la bonne raison qu'on doit sommer tous les termes divergents si l'on veut comparer valablement la théorie à l'expérience aux très basses températures. Cette nécessité a été clairement exposée par Roulet, Gavoret et Nozières⁽⁷⁾, dans un autre contexte. Disons tout de suite que ce programme semble actuellement hors d'atteinte.

Dans les paragraphes suivants, nous allons rappeler brièvement les principales approches théoriques, ce qui nous permettra ensuite de situer notre propre "contribution à l'étude de l'effet Kondo" dans l'ensemble des méthodes actuelles.

1 - 2) Principales approches théoriques.

On peut dire qu'il existe actuellement trois approches principales qui sont :

- l'approche diagrammatique d'Abrikosov
- l'approche de Nagaoka (découplage)
- l'approche de Suhl (Théorie de la dispersion)

Il existe évidemment d'autres approches, que nous rappellerons brièvement.

1 - 2) 1. Approche d'Abrikosov.

Abrikosov⁽⁶⁾ a imaginé une méthode permettant d'étendre au cas de l'Hamiltonien de Kondo l'emploi des diagrammes du type Feynmann-Matsubara. Cette méthode permet d'écrire tous les termes de la série représentant la matrice T sous forme de diagrammes, le problème étant évidemment de les sommer. Abrikosov a effectué cette sommation à l'approximation des termes les plus divergents, c'est à dire en extrayant de chaque diagramme sa partie la plus divergente en $\log \omega$. Malheureusement, cela n'a pas donné un résultat satisfaisant*

puisque'il trouve, pour la partie imaginaire de la matrice T :

$$\text{Im } T = \frac{\text{Im } T^2}{(1 - 2 J\rho \text{ Log } \frac{\omega}{D})^2}$$

où T^2 est la matrice T à l'ordre 2, ρ la densité d'état et D la largeur de la bande. Cette expression est, si l'on peut dire, encore bien plus divergente puisque'au lieu d'une divergence logarithmique en $J^3 \text{ Log } \frac{\omega}{D}$ on a maintenant, pour $J < 0$, un pôle pour $\omega = T_K = D \exp(\frac{1}{2J\rho})$

On pense naturellement que les choses s'arrangeraient si on sommait les autres termes moins divergents, chose plus facile à dire qu'à faire. Les méthodes suivantes (Nagaoka et Suhl) somment effectivement des termes moins divergents (tout en redonnant bien sûr les termes les plus divergents) ce qui permet de régulariser la matrice T.

1 - 2) 2. Le découplage de Nagaoka⁽⁸⁾.

C'est une généralisation du découplage "Hartree-Fock". Dans le cas de l'interaction de Kondo, le découplage "Hartree-Fock" (après une seule dérivation) ne donne rien et il faut dériver deux fois la fonction de Green pour pouvoir écrire un découplage significatif. Le système d'équations self-consistentes obtenues a été résolu de façon approchée par Nagaoka qui a pu montrer :

- que ce système redonnait bien en perturbations la série des termes les plus divergents donnés par Abrikosov (mais sans prouver d'une façon indépendante d'Abrikosov qu'on avait bien tous les termes les plus divergents).

- que pour $T \rightarrow 0$, la résistivité tendait simplement vers la limite unitaire (plateau de Nagaoka) tout en restant régulière quelle que soit la température.

Ce tableau encourageant a été perturbé par la solution exacte des équations self-consistentes de Nagaoka, solution exacte donnée par Hamman-Bloomfield⁽⁹⁾ et Zittartz-Müller Hartmann⁽¹⁰⁾. Si tout se passe effectivement très bien pour la matrice T (donc pour la résistivité), il n'en va pas de même

pour la susceptibilité magnétique : Zittartz a pu la calculer exactement et a trouvé que pour $T \rightarrow 0$, elle avait le comportement suivant :

$$\chi - \chi_{\text{Pauli}} \approx \frac{1}{3} \frac{g^2 \mu_B^2}{kT} \left(S(S+1) - \left(S + \frac{1}{2}\right) \right)$$

Ce résultat montre que les termes moins divergents ne sont pas correctement pris en compte par le découplage de Nagaoka. En effet, dans le cas d'un spin localisé de longueur $\frac{1}{2}$, on trouve une loi de Curie avec une constante de

Curie négative (égale à $-\frac{1}{3} \frac{g^2 \mu_B^2}{kT} \frac{1}{4}$)

1 - 2) 3. L'approche de Suhl ⁽¹²⁾

Elle est inhabituelle en physique des Solides : Suhl a appliqué au cas de l'effet Kondo, la théorie de Chew-Low, initialement employée dans le problème de la diffusion méson-nucléon. Afin d'obtenir des équations fermées pour la matrice T, Suhl est conduit à ne retenir dans l'équation de Chew-Low que les états intermédiaires à un seul électron (alors que l'équation exacte de Chew-Low implique également des états intermédiaires à un électron + une paire électron trou, empêchant du même coup l'existence d'une équation fermée pour la matrice T). Cette approximation conduit donc aux équations de Suhl pour l'effet Kondo, équations initialement dérivées à température nulle, mais que Suhl a ensuite généralisé à température finie. La solution exacte de ces équations a été donnée par Suhl et Wong ⁽¹³⁾. Les résultats sont analogues à ceux donnés par la méthode de Nagaoka (en particulier régularité de la matrice T à toutes températures). En fait, en se basant sur la solution exacte des équations de Nagaoka, Zittartz ⁽¹⁴⁾ a pu montrer que ces deux approches étaient strictement équivalentes. Cette équivalence est loin d'être évidente car elle se voit sur les solutions des équations et non sur les équations elles-mêmes. Auparavant Duke et Silverstein ⁽¹⁵⁾ avaient pu dériver les équations de Suhl à partir de l'approche diagrammatique d'Abrikosov, en utilisant la version simplifiée des équations de Bethe-Salpeter, valable seulement pour les termes les plus divergents. De même Keiter ⁽¹⁶⁾ a également montré l'équivalence entre l'approche diagrammatique et l'approche de Suhl. Enfin, Theumann ⁽¹⁷⁾ a montré que les équations du parquet linéarisé de

Duke et Silverstein⁽¹⁸⁾ satisfaisaient au découplage de Nagaoka. Il existe donc des relations plus ou moins strictes entre ces trois approches principales. (Nous disons plus ou moins strictes parce que la méthode de sommation du parquet d'Abrikosov ne concernant que les termes les plus divergents, ne peut évidemment être équivalente à une autre méthode que pour les termes les plus divergents).

1 - 2) 4. Autres approches

Nous devons citer pour être complet :

1 - 2) 4. 1 - Approche de Doniach⁽¹⁹⁾.

C'est une approche diagrammatique différente de celle d'Abrikosov parce que Doniach traite directement les opérateurs de spin S_x , S_y , S_z sans introduire un champ virtuel comme Abrikosov.

1 - 2) 4. 2 - Les découplages anormaux.

Cette approche a été employée pour la première fois par Takano et Ogawa⁽²⁰⁾. Elle consiste à représenter le spin localisé $\vec{S}$ à l'aide d'un champ de fermions virtuels, d'opérateurs de création et de destruction a_i^+ et a_j , comme on le fait dans la méthode d'Abrikosov. On admet alors que les fonctions de Green anormales $\langle c/a^+ \rangle$ et $\langle a/c^+ \rangle$ ont un sens (Les c^+ , c sont les opérateurs de création et de destruction du champ électronique). On peut alors trouver les équations du mouvement pour ces fonctions de Green anormales et obtenir un découplage significatif après une seule dérivation, ce qui simplifie les équations self-consistantes. Mais les valeurs moyennes introduites, du type $\langle c^+ \rangle$ et $\langle a^+ c \rangle$ impliquent une variation du nombre d'électrons (ce qui pourrait se concevoir par analogie avec la solution B. C. S. de l'interaction supraconductrice) mais également une fluctuation du nombre de particules virtuelles. Il est difficile de comprendre ce dernier point, le champ virtuel ne représentant correctement le spin localisé que si justement le nombre de particules virtuelles est strictement égal à 1. La base de cette méthode n'est donc pas claire. Récemment cette idée a été reprise par Kurata⁽²¹⁾, qui trouve des résultats plaisants à basse température (en particulier une susceptibili-

té magnétique finie à température nulle) mais ne retrouve pas les divergences en $\log \omega$ de la matrice T à haute température.

1 - 2) 4. 3 - Méthodes variationnelles.

On cherche une expression approchée de l'état fondamental du système en essayant d'imaginer des formes de fonction d'onde conduisant à un calcul accessible lorsqu'on écrit que l'énergie est stationnaire pour la variation des paramètres de la fonction d'onde. On doit citer les fonctions d'ondes de Yoshida⁽²²⁾, de Kondo-Appelbaum⁽²³⁾ et d'Anderson⁽²⁴⁾. Une des difficultés de cette méthode est son extension nécessaire à température finie en définissant les excitations élémentaires du système.

1 - 2) 4. 4 - Méthode "spin-bosons"

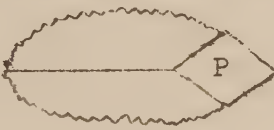
Signalons pour finir cette revue la nouvelle approche d'Emery et Luther⁽²⁵⁾ basée sur l'équivalence (pour la fonction de partition) entre l'Hamiltonien de Kondo et un certain Hamiltonien "spin-bosons" plus simple.

2 - Contenu de la thèse.

En étudiant les méthodes précédentes, il y avait parfois des points qui nous paraissaient obscurs. La plus grande partie de cette thèse consiste en deux mises au point au sujet de deux aspects de la théorie qui nous avaient semblé paradoxaux.

2 - 1) Deuxième chapitre

Ainsi le deuxième chapitre est consacré à la relation entre l'approche d'Abrikosov⁽⁵⁾ et celle de Nagaoka⁽⁷⁾. Nous ne comprenions pas le fait suivant : avec les notations d'Abrikosov, l'approche d'Abrikosov montre que chaque dia-

gramme de l'ensemble $T_{\text{div}} =$  (où P est le vertex parquet)

contribue aux termes les plus divergents en $\log \omega$ de la matrice T . Il est d'autre

part clair que cet ensemble de diagrammes T_{div} ne vérifie pas le découplage de Nagaoka, ce qui fait qu'on ne voit pas clairement pourquoi les équations self-consistantes de Nagaoka redonnent bien les termes les plus divergents. Ce que nous avons montré au chapitre II, c'est qu'à l'approximation des termes les plus divergents, on pouvait resommer les diagrammes de T_{div} de façon à obtenir une relation de la forme :

$$(2.11) \quad \text{Diagramme à P} = \underbrace{\left\{ \text{Diagramme 1} + \text{Diagramme 2} + \text{Diagramme 3} + \dots \right\}}_{div}$$

où le deuxième membre, formé exclusivement de diagrammes en échelle, vérifie le découplage de Nagaoka (les accolades $\{ \}$ indiquent que les diagrammes en échelle sont compris avec des coefficients convenables).

Ce deuxième chapitre n'apporte donc rien de nouveau dans le fond, l'équivalence Abrikosov-Nagaoka est connue depuis longtemps de façon plus ou moins directe comme cela a été rappelé en 1 - 2) 3. Par contre, ce deuxième chapitre est peut-être intéressant dans la forme, par la façon assez directe dont est démontré l'équation (2.1.1)

2 - 2) Troisième chapitre.

Un autre point à priori embarrassant apparaît quand on étudie la méthode d'Abrikosov : on remarque que cette méthode (introduction d'un champ virtuel, puis projection sur les états à une seule particule virtuelle) pourrait être employée dans le problème de la diffusion normale (diffusion par un potentiel indépendant du spin) bien que cela soit à priori prodigieusement inutile. L'ayant fait dans le but d'observer le mécanisme de la méthode dans ce cas très simple, nous avons constaté que seule la somme des diagrammes sans boucles électroniques (tels ) donnaient bien le résultat attendu :

$$T = x + x \text{---} x + x \text{---} x \text{---} x + \dots$$

Les diagrammes avec boucles électroniques, (tels ) sont

donc indésirables, bien qu'on ne voit pas à priori pourquoi les éliminer. Cet exemple montrant que la méthode d'Abrikosov n'est pas très bien comprise, nous l'avons reprise depuis le début, ce qui permet d'élucider ce petit mystère des termes à boucles électroniques, mais surtout dans le cas de la diffusion de Kondo, de préciser exactement la contribution à la matrice T des diagrammes à boucles électroniques. Le résultat est qu'on ne doit pas renormaliser la ligne virtuelle, mais seulement les vertex et en affectant aux diagrammes des coefficients effectifs à la place des coefficients usuels. Nous avons également constaté que la méthode d'Abrikosov (introduction d'un champ virtuel pour représenter le spin localisé et projection sur les états à une seule particule virtuelle) conduit automatiquement aux diagrammes de Balian, Bloch et de Dominici^(25 - 26 - 27). Ils apparaissent comme les mieux adaptés au traitement de l'interaction de Kondo et nous les utiliserons exclusivement au cours de ce 3ème chapitre, ce qui permettra d'expliquer sur ce cas particulier certaines propriétés intéressantes de ces diagrammes.

1 - 2) 3. Quatrième chapitre.

Enfin, dans le 4ème chapitre, nous introduisons une approximation "d'Invariance par translation" qui permet d'obtenir une équation intégrale approchée pour la matrice T. Il s'agit d'une équation intégrale linéaire avec un 2ème membre, qui redonne au plus bas ordre la série des termes les plus divergents d'Abrikosov. Cette équation est la suivante :

$$\begin{array}{c} \text{Diagram of a semi-circle labeled T} \\ \hline = 3 \frac{j^2}{N} \times \text{Diagram of a horizontal line with a semi-circle labeled T} \\ \hline - 2j \text{ Diagram of a horizontal line with a dashed loop labeled T} \end{array}$$

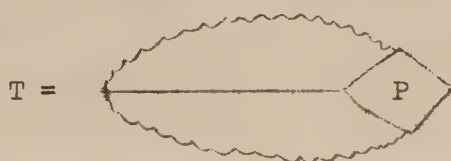
où $\text{---}_{t'} \rightarrow \text{---}_t = \text{sign}(t - t')$. Nous n'avons pas étudié cette équation et ne savons pas si elle est satisfaisante à basse température. Outre la façon de l'obtenir, qui est intéressante en elle-même, nous avons expliqué au chapitre 4 que cette équation était plus conforme à l'approche diagrammatique que celle de Nagaoka.

C H A P I T R E I I

RELATION ENTRE L'APPROCHE DIAGRAMMATIQUE D'ABRIKOSOV ET LE DECOUPLAGE DE NAGAOKA.

INTRODUCTION -

Bien qu'on sache depuis longtemps que le découplage de Nagaoka⁽⁸⁾ donne les termes les plus divergents en $\text{Log } \omega$ pour la matrice T , ce fait semble paradoxal lorsqu'on étudie ces termes les plus divergents par la méthode d'Abrikosov⁽⁵⁾. Ils sont en effet donnés par l'ensemble des diagrammes:



et tous les termes du parquet P contribuent effectivement aux termes les plus divergents. Or, il est clair que si on écrit la fonction de Green en fonction de T , c'est à dire

$$\begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{t'} \qquad \text{t} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{t'} \qquad \text{t} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{t'} \qquad \text{t} \end{array} \text{Diagramme}$$

et si on dérive en t cette expression approchée, on ne peut pas obtenir de découplage car l'ensemble des diagrammes du parquet est trop complexe pour satisfaire à un découplage. Nous allons montrer que si on ne s'intéresse qu'à la partie la plus divergente (en $\text{Log } \omega$) de chaque diagramme de T , on peut alors resommer tous les diagrammes de T (à cette approximation des parties les plus divergentes) et qu'après cette sommation T sera simplement une somme de diagrammes en échelle, soit

$$T = \left\{ \text{Diagramme 1} + \text{Diagramme 2} + \text{Diagramme 3} + \dots \right\}$$

(L'accolade $\{ \}$ indique que les diagrammes en échelle ont des coefficients

appropriés) et sous cette forme on vérifiera facilement le découplage de Nagaoka.

Cette question a été étudiée depuis longtemps : par exemple, l'équivalence Nagaoka-Abrikosov résulte de la relation entre l'approche diagrammatique et l'approche de Suhl (Duke et Silverstein⁽¹⁵⁾, Keiter⁽¹⁶⁾) et de l'équivalence exacte entre l'approche de Suhl et celle de Nagaoka (Zittartz⁽¹⁴⁾). On peut suivre également Theumann⁽¹⁷⁾ qui a montré que les équations des parquets linéarisés de Duke et Silverstein⁽¹⁸⁾ satisfont au découplage de Nagaoka. Notre travail n'apporte donc rien de nouveau dans le fond mais est peut-être intéressant dans la forme par la façon très directe dont est obtenue la forme "en échelle" de la matrice T, à l'approximation des termes les plus divergents.

1 - Généralités.

Commençons par bien préciser la question de la valeur de J lorsqu'on écrit l'interaction de Kondo :

Kondo, Abrikosov et la plupart des gens l'écrivent sous la forme :

$$H_{int} = - 2 J \vec{s} \vec{S} = - \frac{J}{N} \sum_{\substack{k, k' \\ s, s'}} c_{ks}^+ c_{k's'} \vec{\sigma}_{ss'} \cdot \vec{S}$$

où les $\vec{\sigma}$ sont des matrices de Pauli.

Nagaoka l'écrit sous la forme :

$$H_{int} = - J_N \vec{s} \vec{S}$$

Dans ce travail, nous ne considérons qu'un spin localisé de longueur $\frac{1}{2}$ pour simplifier et nous écrirons l'interaction de Kondo sous la forme :

$$H_{int} = - 4j \vec{s} \vec{S} = - \frac{j}{N} \sum_{\substack{k, k' \\ s, s'}} c_{ks}^+ c_{k's'} \vec{\sigma}_{ss'} \cdot \vec{S}'$$

où $\vec{\sigma}$ et $\vec{S}'$ sont des matrices de Pauli.

Ceci évitera des facteurs $(\frac{1}{2})^n$ dans le calcul des coefficients et nous ne reviendrons qu'en fin de calcul à la forme de Nagacka, afin de comparer les coefficients.

Nous allons employer la méthode d'Abrikosov (introduction d'un champ virtuel, puis projection sur les états à une seule particule virtuelle pour représenter l'opérateur $\vec{S}$). Pour des explications sur cette méthode, on pourra voir la référence⁽⁵⁾ et également se reporter à l'annexe 1 où les bases de la méthode sont expliquées en détail. Nous employons les notations de l'annexe 1.

Nous posons donc, suivant Abrikosov :

$$H_{\text{int}} = - \frac{j}{N} \sum_{kk'} c_{ks}^+ c_{k's'} \vec{\sigma}_{ss'} \cdot \vec{S}_{\sigma\sigma'} a_{\sigma}^+ a_{\sigma'}$$

où a_{σ}^+ et a_{σ} sont les opérateurs de création et de destruction du champ de fermions virtuels. $\vec{\sigma}$ et $\vec{S}$ sont des matrices de Pauli. On peut alors développer la matrice T en série de diagrammes de Feynmann-Matsubara-Abrikosov dépendant d'un paramètre λ . L'opération projection sur les états à une seule particule virtuelle consiste à prendre pour chaque diagramme $D(\lambda)$ la limite $D = e^{\beta\lambda} D(\lambda)$. Comme on ne s'intéresse qu'aux termes les plus divergents $\lambda \rightarrow \infty$

en $\text{Log } \omega$, on ne considère que des diagrammes sans boucles électroniques.

1 - 1) Origine des divergences

L'observation de la fameuse divergence de Kondo, en $j^3 \text{Log } \omega$, fait ressortir clairement l'origine des divergences. Les termes en j^3 de la matrice T sont :

$$T^3(\lambda) = D_1 + D_2$$

$$D_1 = \text{diagramme 1} ; \quad D_2 = \text{diagramme 2}$$

L'origine de la divergence est la suivante : par suite du caractère d'opérateur associés aux vertex (coefficients $\vec{\sigma}_{s_1 s_2}$ $\vec{S}_{\sigma_1 \sigma_2}$) les coefficients de spin

associés à ces deux diagrammes sont opposés (pour la définition du coefficient de spin $S(D)$ associé à un diagramme D de la matrice T , voir l'annexe 1 ; on a en effet pour le premier diagramme :

$$S(D_1) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma} \text{Tr}(S_\alpha S_\beta S_\gamma) \langle s | \sigma_\alpha \sigma_\beta \sigma_\gamma | s \rangle = -3$$

tandis que pour le 2ème, on a

$$S(D_2) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma} \text{Tr}(S_\alpha S_\beta S_\gamma) \langle s | \sigma_\alpha \sigma_\beta \sigma_\gamma | s \rangle = 3$$

On a donc, en explicitant les coefficients de spin

$$(111) \quad T^3(\lambda) = 3 \left[\text{diagramme 1} - \text{diagramme 2} \right]$$

Or on peut faire la remarque suivante à propos de la méthode d'Abrikosov : on pourrait très bien l'employer pour étudier une diffusion normale (diffusion par un potentiel indépendant du spin). Au lieu de traiter directement l'interaction :

$$\mathcal{V} = \frac{V}{N} \sum_{kk'} \sum_s c_{ks}^+ c_{k's}$$

$$\text{on l'écrirait: } \mathcal{V} = \frac{V}{N} \sum_{kk'} \sum_s c_{ks}^+ c_{k's} a^+ a$$

(en introduisant un champ virtuel à un seul état) et on la traiterait par la méthode d'Abrikosov. On obtiendrait, au 3ème ordre en V , pour la matrice T de la diffusion normale (soit T_N) :

$$(112) \quad T_N^3(\lambda) = \text{diagramme 1} + \text{diagramme 2} \quad \text{et}$$

on est sûr que :

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} e^{\beta\lambda} \left(\text{diagramme 1} + \text{diagramme 2} \right) = \text{diagramme 3}$$

puisque c'est ce qu'on obtiendrait directement sans introduire de champ virtuel.

En comparant (111) à (112) on voit que c'est évidemment l'introduction de coefficients de spin $S(D)$ qui est à l'origine des divergences. La même chose se reproduit évidemment à tous les ordres : si les coefficients de spin $S(D)$ des $(n - 1) !$ diagrammes sans boucles électroniques étaient les mêmes, on aurait simplement une diffusion normale :

$$T_N^n = \underbrace{x \text{---} x \text{---} x \text{---} x \text{---} x}_{n \text{ interactions } \times}$$

La présence de coefficients de spin $S(D)$ intempestifs empêche ce regroupement et est à l'origine des divergences. Cette remarque, qui semble triviale, nous permettra pourtant de regrouper les termes les plus divergents sous une forme telle que le découplage de Nagacka devienne évident. Pour cela, on commence par affecter à l'ensemble des diagrammes du parquet, un coefficient commun, convenablement choisi (et alors leur somme est nulle à l'approximation des termes les plus divergents). Ensuite, on corrige l'erreur commise en se limitant aux termes les plus divergents, ce qui fera apparaître les diagrammes en échelle dont nous avons parlé dans l'introduction.

1 - 2) Définition du parquet P

Abrikosov a montré que les termes les plus divergents de la matrice T étaient de la forme

$$T = \text{diagramme en échelle}$$

où P est le parquet à propagateurs nus. La définition du parquet à propagateurs nus est la suivante : c'est la solution des équations de Bethe-Salpeter lorsqu'on ne renormalise pas les propagateurs de liaison et qu'on se contente de remplacer le vertex irréductible par le vertex élémentaire, soit :

$$\begin{aligned}
 \boxed{P} &= \boxed{R} + \boxed{\gamma_1} + \boxed{\gamma_2} \\
 (121) \quad \boxed{\gamma_1} &= \boxed{R + \gamma_2} \text{ --- } \boxed{P} \\
 \boxed{\gamma_2} &= \boxed{R + \gamma_1} \text{ --- } \boxed{P} \\
 \boxed{R} &= \text{---} \text{---} \text{---} = \boxed{\gamma}
 \end{aligned}$$

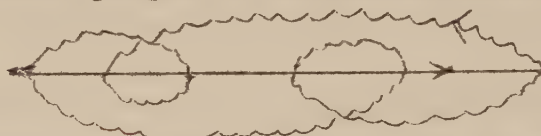
on néglige donc :

- la renormalisation des lignes électroniques (qui est en effet négligeable dans la méthode d'Abrikosov)

- la renormalisation de la ligne virtuelle (Nous montrerons au chapitre 3 qu'il ne faut pas en tenir compte, car cette renormalisation, qui introduit des divergences en $\frac{1}{T}$, est finalement compensée par le dénominateur $\langle \mathcal{F}(\beta) \rangle$)

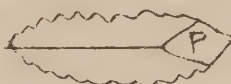
- l'influence des vertex irréductibles et la renormalisation des vertex par des boucles électroniques (Nous montrons au chapitre 3 qu'il faut définir des coefficients de spin effectifs si on veut renormaliser les vertex par des boucles électroniques). Quoiqu'il en soit, l'ensemble des diagrammes définis par les équations (121), malgré tout ce qu'il néglige, est déjà très important et difficile à prendre en compte pratiquement. En particulier, il est clair que la matrice T définie à l'aide du parquet ne vérifie aucun découplage. En

effet, un diagramme tel que



fait

visiblement partie de l'ensemble

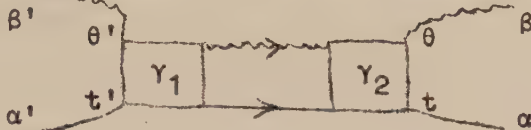


et ne vérifie abso-

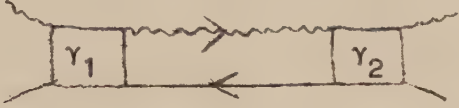
lument pas le découplage de Nagaoka. Il est donc clair qu'il doit exister un regroupement permettant de sommer partiellement les diagrammes du parquet, de façon à les ramener uniquement à des diagrammes vérifiant le découplage de Nagaoka (ce regroupement n'étant bien entendu valable que dans la mesure où l'on extrait de chaque diagramme du parquet sa partie la plus divergente en $\log \omega$). Pour effectuer ce regroupement, nous avons besoin d'introduire une notation pratique qui nous permettra d'écrire les diagrammes du parquet sans avoir à les dessiner,

1 - 3) Notation abrégée pour les produits de vertex.

Soit deux vertex quelconques γ_1 et γ_2 relatifs à la diffusion de Kondo ; il n'y a que deux façons de les "multiplier" que nous notons :

$$\gamma_1 \circ_K \gamma_2 =$$


et

$$\gamma_1 \times_K \gamma_2 =$$


La première est la multiplication "directe", la seconde, la multiplication "inverse". Par exemple, en explicitant la multiplication directe, on a :

$$\gamma_1 \circ_K \gamma_2 = \sum_{\alpha'', \beta''} \int_0^\beta dt_1 d\theta_1 dt_2 d\theta_2 \gamma_1(t', t_1; \theta', \theta_1, \alpha', \alpha''; \beta', \beta'') \times$$

$$\gamma_2(t_2, t; \theta_2, \theta, \alpha'', \alpha; \beta'', \beta) g(t_2 - t_1) G_\lambda(\theta_2 - \theta_1)$$

où g est la fonction de Green libre pour les électrons et G_λ la fonction de Green virtuelle. Remarquons bien que dans ce chapitre nous n'introduisons pas le coefficient $\frac{1}{2S+1} = \frac{1}{2}$ dans la définition des coefficients de spin des vertex,

ceci pour des raisons de commodité concernant la multiplication des vertex. Le coefficient $\frac{1}{2}$ est pris en compte lorsqu'on quitte les diagrammes vertex pour revenir aux diagrammes de la matrice T et compense le facteur 2 dû à la trace.

Exemple :



$$= j^2 g(t - t') G_\lambda(t - t') (3 - 2\bar{\sigma} \bar{s})$$



$$= - 3j^2 g(t - t') G_\lambda(t - t') G_\lambda(t' - t)$$

A cause de l'invariance par rotation, n'importe quel vertex K est de la forme :

$$K = K^0 + K^1 \bar{\sigma} \bar{s}$$

On peut alors décomposer l'opérateur de multiplication directe o_k sous la forme d'un produit

$$o_k = o_n o_s$$

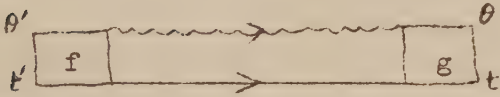
o_n n'agit que sur les parties K^0 et K^1 uniquement fonctions des temps, tandis que o_s n'agit que sur la partie de spin $\bar{\sigma} \bar{S}$ des vertex. En identifiant, on obtient :

$$\bar{\sigma} \bar{S} o_s \bar{\sigma} \bar{S} = 3 - 2 \bar{\sigma} \bar{S} \text{ et}$$

$$A o_s \bar{\sigma} \bar{S} = A \bar{\sigma} \bar{S} = \bar{\sigma} \bar{S} o_s A$$

$A o_s B = A B$ où A et B sont des constantes par rapport aux spins σ et S . Ces relations définissent complètement l'opérateur de multiplication directe de spin o_s

D'une façon analogue, on aura :

$$f(t', t_1 ; \theta', \theta_1) o_n g(t_2, t ; \theta_2, \theta) =$$


$$= \int_0^\beta dt_1 dt_2 d\theta_1 d\theta_2 f(t', t_1 ; \theta', \theta_1) g(t_2, t ; \theta_2, \theta) g(t_2 - t_1) G_\lambda(\theta_2 - \theta_1)$$

c'est à dire que o_n agit comme agirait la multiplication directe de vertex en diffusion normale. o_n se comporte comme une constante par rapport au spin, ce qui finit de définir cet opérateur de multiplication normale directe.

De la même façon, on définit :

$$\gamma_1 *_{\mathbf{k}} \gamma_2 =$$


et on constate qu'on peut l'écrire :

$$*_{\mathbf{k}} = *_{\mathbf{n}} *_{\mathbf{s}} \text{ avec}$$

$\bar{\sigma} \bar{S} \star_s \bar{\sigma} \bar{S} = 3 + 2 \bar{\sigma} \bar{S}$ et une définition évidente pour la multiplication normale inverse $\star_{\bar{n}}$

Exemple :

Si γ est le vertex élémentaire

$$\gamma = \gamma \circ_k \gamma = \begin{array}{c} \text{diagramme} \\ t' \quad t \end{array} = g(t-t') G_\lambda(t-t') \delta(\theta' - t') \delta(\theta - t)$$

$$\bar{\sigma} \bar{S} \circ_s \bar{\sigma} \bar{S}$$

Cette notation $\circ_k$ et $\star_k$:

- fournit une règle pratique permettant de calculer rapidement les coefficients de spin des diagrammes du parquet car par définition un vertex parquet est décomposable en produits $\circ_k$ et $\star_k$

- permet de mieux séparer l'aspect "diffusion normale" (symboles $\circ_n$ et $\star_n$) de l'aspect coefficients de spin (symboles $\circ_s$ et $\star_s$) ce qui facilitera le regroupement annoncé précédemment.

A titre d'exemple, nous allons calculer les termes de plus bas ordre de la matrice T et nous verrons apparaître le regroupement sous la forme de diagrammes en échelle. Nous montrerons ensuite que ce regroupement est général.

Parquet P^3 : on réunit dans le tableau suivant les 6 éléments de P^3 avec leur notation abrégée et leur coefficient de spin :

 $\gamma \circ_k \gamma \circ_k \gamma$ $-6 + 7 \bar{\sigma} \bar{S}$	 $(\gamma \star_k \gamma) \circ_k \gamma$ $6 - \bar{\sigma} \bar{S}$	 $\gamma \circ_k (\gamma \star_k \gamma)$ $6 - \bar{\sigma} \bar{S}$
 $\gamma \star_k \gamma \star_k \gamma$ $6 + 7 \bar{\sigma} \bar{S}$	 $(\gamma \circ_k \gamma) \star_k \gamma$ $-6 - \bar{\sigma} \bar{S}$	 $\gamma \star_k (\gamma \circ_k \gamma)$ $-6 - \bar{\sigma} \bar{S}$

Par exemple le coefficient de spin du vertex $(\gamma \circ_k \gamma) \star_k \gamma$ est :

$$(\bar{\sigma} \bar{S} \circ_s \bar{\sigma} \bar{S}) \star_s \bar{\sigma} \bar{S} = (3 - 2 \bar{\sigma} \bar{S}) \star_s \bar{\sigma} \bar{S} = 3 \bar{\sigma} \bar{S} - 2(3 + 2 \bar{\sigma} \bar{S}) = -6 - \bar{\sigma} \bar{S}$$

Matrice T à l'ordre 4 : En explicitant les coefficients de spin des diagrammes sans boucles électroniques contribuant à $T^{(4)}$, on a :

$$T^{(4)} = j^4 (7 \times 3 (\text{diagramme 1} + \text{diagramme 2}) - 3 (\text{diagramme 3} + \text{diagramme 4} + \text{diagramme 5} + \text{diagramme 6}))$$

On sait que si on leur affectait le même coefficient, la somme de ces 6 diagrammes serait nulle (en ne comptant que les termes les plus divergents). Ceci nous donne une relation qui évite le calcul des 4 diagrammes qui ne sont pas en échelle et on a :

$$T^{(4)} = j^4 8 \times 3 (\text{diagramme 1} + \text{diagramme 2})$$

ce qui nous donne le début de la série d'Abrikosov :

$$T = (3j^2 \text{diagramme 1} + 6j^3 (\text{diagramme 3} - \text{diagramme 4}) + 8 \times 3 j^4 (\text{diagramme 1} + \text{diagramme 2}) + \dots)$$

on va maintenant se ramener à n'avoir qu'une seule sorte de diagrammes en échelle : comme on ne s'intéresse qu'aux termes les plus divergents, on peut aussi bien supposer la bande symétrique autour du niveau de Fermi. En effet, d'une façon générale, on peut décomposer la densité d'état en sa partie paire et sa partie impaire

$$n(E) = n^+(E) + n^-(E)$$

La partie impaire $n^-(E)$ ne peut pas contribuer aux termes les plus divergents car $n^-(0) = 0$. Pour une bande symétrique, le propagateur électronique $g(t)$ est impair. Si alors on décompose un vertex K en sa partie scalaire K^0 et sa partie opérateur $K^1 \bar{\sigma} \bar{S}$ (soit $K = K^0 + K^1 \bar{\sigma} \bar{S}$) on peut voir facilement que K^0 est impair en t et t'

$$K^0(t, t' ; \theta', \theta) = - K^0(t', t ; \theta', \theta)$$

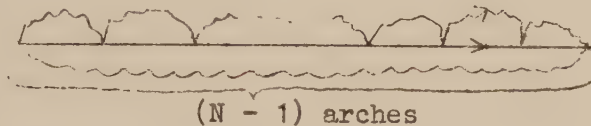
tandis que K^1 est pair :

$$K^1(t, t') ; \theta, \theta') = K^1(t', t ; \theta', \theta)$$

Ceci permet d'écrire le début de la série d'Abrikosov sous la forme de diagrammes en échelle "directs" soit :

$$T = (3j^2 \text{ [diagram 1] } + 12 j^3 \text{ [diagram 2] } + 16 \times 3j^4 \text{ [diagram 3] } + \dots)$$

On commence à voir apparaître le découplage de Nagaoka. Il faudrait qu'on puisse ramener (pour les termes les plus divergents) l'ensemble des diagrammes d'ordre N à un seul diagramme de la forme :



C'est ce que nous allons faire maintenant.

2 - Méthode de comparaison.

2 - 1) Principe de la méthode.

Il est clair que les divergences viennent du fait que dans le cas de la diffusion de Kondo, la multiplication de spin directe o_s introduit des coefficients différents de la multiplication de spin inverse x_s . Notre idée est de commencer par sommer tout le parquet en affectant le même coefficient aux multiplications o_s et x_s (alors on obtient une somme nulle en ce qui concerne les termes les plus divergents). Nous corrigeons ensuite cette erreur, mais en nous limitant aux termes les plus divergents. Pour cela on définit la multiplication de spin $\Delta(x)$ par la relation :

$$\bar{\sigma} \bar{S} \Delta(x) \bar{\sigma} \bar{S} = 3 + 2 \bar{\sigma} \bar{S} + x \bar{\sigma} \bar{S} \quad \text{ce qui veut dire que :}$$

$$\Delta(0) = x_s \quad \Delta(-4) = o_s$$

Dans chaque diagramme du parquet, on remplacera les multiplications o_s par $\Delta(x)$

(sans toucher aux multiplications $\times_s$). La somme du parquet devient alors une fonction de x , de même la matrice T (à l'approximation du parquet) devient :

$$T(x) = T(0) + x T^1(x) + \dots + x^n T^n(x) + \dots$$

Pour $x = 0$, toutes les multiplications sont du type $\times_s$; tous les coefficients des diagrammes parquets d'ordre n pour T seront égaux entre eux ; donc $T(0) = 0$ (pour les termes les plus divergents). Maintenant, observons pour fixer les idées le parquet du 3ème ordre ; avant remplacement de o_s par $\Delta(x)$ on a :

$$\begin{aligned} P^{(3)} &= \gamma o_k \gamma o_k \gamma + (\gamma \times_k \gamma) o_k \gamma + \gamma o_k (\gamma \times_k \gamma) \\ &+ \gamma \times_k \gamma \times_k \gamma + (\gamma o_k \gamma) \times_k \gamma + \gamma \times_k (\gamma o_k \gamma) \\ &= \gamma o_n o_s \gamma o_n o_s \gamma + (\gamma \times_n \times_s \gamma) o_n o_s \gamma + \gamma o_n o_s (\gamma \times_n \times_s \gamma) \\ &+ \gamma \times_n \times_s \gamma \times_n \times_s \gamma + (\gamma o_n o_s \gamma) \times_n \times_s \gamma + \gamma \times_n \times_s (\gamma o_n o_s \gamma) \end{aligned}$$

Après remplacement, on a :

$$\begin{aligned} P^{(3)}(x) &= \gamma o_n \Delta(x) \gamma o_n \Delta(x) \gamma + 5 \gamma \times_n \times_s \gamma o_n \Delta(x) \gamma + \gamma o_n \Delta(x) (\gamma \times_n \times_s \gamma) \\ &+ \gamma \times_n \times_s \gamma \times_n \times_s \gamma + (\gamma o_n \Delta(x) \gamma) \times_n \times_s \gamma + \gamma \times_n \times_s (\gamma o_n \Delta(x) \gamma) \end{aligned}$$

$\begin{matrix} (2, 1, 0) & (1, 0) & (1, 0) \\ \gamma \times_n \times_s \gamma & \gamma o_n \Delta(x) \gamma & \gamma \times_n \times_s \gamma \end{matrix}$

Sous chaque terme nous avons indiqué les puissances de x que ce terme peut fournir lorsqu'on développe $p^{(3)}(x)$ en puissances de x . On remarque que seul le diagramme en échelle $\gamma o_k \gamma o_k \gamma$ peut donner un terme en x^2 . D'ailleurs ce terme donne naissance à la correction en T (pour $x = 4$)

$$\delta T^{(4)} = 3 \times 4^2 \times j^4 \quad \text{[Diagramme en échelle avec deux boucles]} ,$$

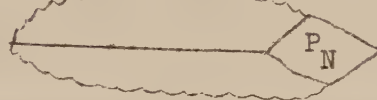
c'est à dire exactement le terme en j^4 que nous avons calculé directement.

Nous allons montrer que ce résultat est général, c'est à dire que pour un ordre donné n , les termes les plus divergents de $T^{(n)}$ sont donnés seulement par la correction de puissance maximum en x , soit x^{n-2} (et alors cette correction est formée uniquement de diagrammes en échelle directe)

2 - 2) Les termes les plus divergents sont ceux de puissance maximum en x.

On va supposer que c'est vrai pour :

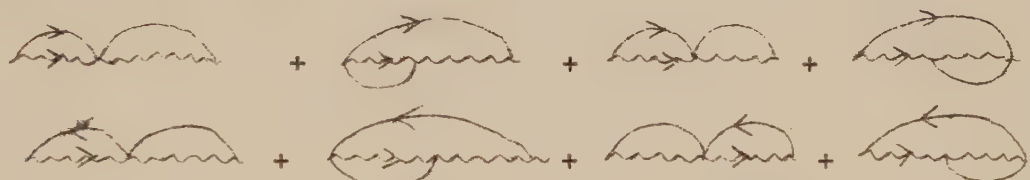
$T^{(N)} =$  et on va montrer que c'est vrai pour :

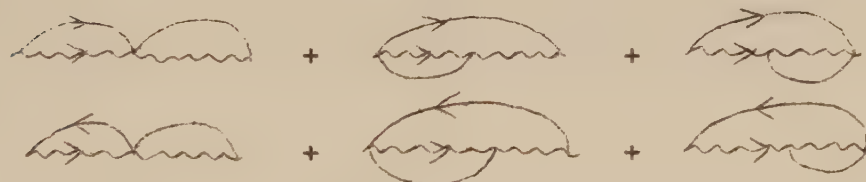
$T^{(N+1)} =$ 

Il existe une façon relativement simple de passer de P_{N-1} à P_N : remplacer successivement tous les vertex élémentaires de P_{N-1} par le vertex du 2ème ordre

$P^{(2)} =$  . Nous obtenons ainsi un certain ensemble de diagrammes Δ_N . Il contient tous les diagrammes de P_N mais peut contenir plusieurs fois le même diagramme de P_N . On passe donc de Δ_N à P_N en ramenant à 1 tous les coefficients des diagrammes de Δ_N

Exemple : $P_2 =$ 

$\Delta_3 =$ 

$P_3 =$ 

Donc on passe de même de $T^{(N)}$ à $T^{(N+1)}$ en remplaçant successivement chaque vertex de P_{N-1} par P_2 , puis en éliminant les duplications

Mais

$$P_2(x) = \gamma \circ_n \Delta(x) \gamma + \gamma \times_n \times_s \gamma$$

$$= P_2^n (3 + 2 \bar{\sigma} \bar{S}) + x \text{  } \bar{\sigma} \bar{S}$$

on voit que si on veut la puissance maximum de x, il faut ne substituer que

la partie  $\bar{\sigma} \bar{S}$. Pour obtenir un terme de puissance moindre, il faut substituer $P_2^n(3 + 2 \bar{\sigma} \bar{S})$; or une telle substitution donne nécessairement un terme moins divergent, puisque le vertex P_2^n est normal. Il résulte bien que les termes les plus divergents sont les termes de puissance maximum en x .

Exemples :

$$\text{Diagram of a semi-circular loop with an arrow pointing right, containing } P_2^n(3 + 2 \bar{\sigma} \bar{S}) = 3 j^3 (\text{Diagram of a semi-circular loop with an arrow pointing right} + \text{Diagram of a semi-circular loop with an arrow pointing right})$$

est un terme non divergent.

De même :

$$\text{Diagram of a semi-circular loop with an arrow pointing right, containing } P_2^n(3 + 2 \bar{\sigma} \bar{S}) \text{ diverge seulement en } j^5 \text{ Log}^2(\omega) \dots \text{etc}$$

Conclusion : La série des termes les plus divergents peut bien se mettre sous la forme :

$$T = 3j^2 (\text{Diagram of a semi-circular loop with an arrow pointing right} + 4j \text{Diagram of a semi-circular loop with an arrow pointing right} + (4j)^2 \text{Diagram of a semi-circular loop with an arrow pointing right} + \dots + (4j)^N \text{Diagram of a semi-circular loop with an arrow pointing right} + \dots)$$

Remarque : On peut s'étonner d'avoir un résultat disymétrique ; mais n'oublions pas que la définition de $\Delta(x)$ est elle-même disymétrique ; si on avait défini $\Delta(x)$ par :

$$\bar{\sigma} \bar{S} \Delta(x) \bar{\sigma} \bar{S} = 3 - 2 \bar{\sigma} \bar{S} + x \bar{\sigma} \bar{S}, \text{ on aurait eu } \Delta(0) = 0_s \text{ et } \Delta(4) = \times_s$$

ce qui nous aurait donné une matrice T exprimée à l'aide de diagrammes en échelles inverses et un changement de j en $-j$:

$$T = 3j^2 (\text{Diagram of a semi-circular loop with an arrow pointing right} - 4j \text{Diagram of a semi-circular loop with an arrow pointing right} + (-4j)^2 \text{Diagram of a semi-circular loop with an arrow pointing right} + \dots)$$

Ce résultat est identique au précédent car on peut supposer la bande symétrique (pour les termes les plus divergents) et alors on ne change rien en changeant j en $-j$ et en renversant la ligne électronique. Nous avons donc écrit les termes les plus divergents sous une forme très simple. On peut facilement prendre la

partie imaginaire et constater qu'on a bien la série d'Abrikosov. Nous allons seulement montrer que cet ensemble de diagrammes vérifie le découplage de Nagaoka.

3 - Relation avec le découplage de Nagaoka⁽⁸⁾.

Considérons l'équation exprimant la fonction de Green en fonction de la matrice T :

$$\begin{array}{c} k' \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t'} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t} = \begin{array}{c} k' \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t'} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t} + \begin{array}{c} k' \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t'} \begin{array}{c} \text{---} \end{array} \xrightarrow{t} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t}$$

et dérivons la par rapport à t' :

$$\frac{\partial}{\partial t'} \begin{array}{c} k' \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t'} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t} = \epsilon_{k'} \begin{array}{c} k' \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t'} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t} - \delta_{kk'} \begin{array}{c} \text{---} \end{array} \xrightarrow{t'} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t}$$

C'est la première équation de Nagaoka qu'on identifie en posant :

$$\frac{J}{2} \sum_{k'} \Gamma_{kk'}(t - t') = \begin{array}{c} \text{---} \end{array} \xrightarrow{t'} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t}$$

$$\sum_{k'} \Gamma_{kk'} \frac{J}{4} \left[\begin{array}{c} k' \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t'} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t} + J_{t'} \begin{array}{c} k' \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t'} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t} \right.$$

$$\left. + J_{t'} \begin{array}{c} k' \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t'} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t} + \dots \right]$$

(Afin de comparer avec le découplage de Nagaoka, nous avons remplacé j par $\frac{J}{4}$)

On a maintenant, en dérivant une deuxième fois :

$$\frac{\partial}{\partial t'} \Gamma_{kk'}(t - t') = \epsilon_{k'} \Gamma_{kk'} - \frac{3}{4} \frac{J}{2} \begin{array}{c} k' \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t'} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t}$$

$$- \frac{3}{4} \frac{J}{2} J \left[\begin{array}{c} k' \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t'} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t} + \begin{array}{c} k' \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t'} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t} + \dots \right]$$

$$+ \frac{3}{4} \frac{J}{2} J \left[\begin{array}{c} k' \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t'} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t} + \begin{array}{c} k' \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t'} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow{t} + \dots \right]$$



C'est la deuxième équation de Nagaoka, qu'on peut écrire sous sa forme habituelle

$$\frac{\partial}{\partial t'} \Gamma_{kk'}(t - t') = \epsilon_k \Gamma_{kk'} - \frac{J}{N} n_k^0 \sum_{\ell} \Gamma_{k\ell}$$

$$- \frac{J}{2N} \frac{3}{4} \sum_{\ell} G_{k\ell}^0 + \frac{J}{2N} m_k \sum_{\ell} G_{k\ell}^0$$

(Attention : $m_k = -2 \sum_{k'} \Gamma_{k'k}(0)$ alors que

$$n_k^0 = - \sum_k G_{k,k}(0))$$

on a donc bien le découplage de Nagaoka, à part le n_k^0 , à la place de $n_k - \frac{1}{2}$ des équations de Nagaoka, ce qui ne change rien aux termes les plus divergents. Mais on peut alors faire une remarque troublante : c'est que comme la ligne électronique doit toujours rester nue, on ne voit pas à quoi correspond le fait de renormaliser n_k et G dans les équations self consistentes de Nagaoka.

Considérons, en effet, l'ensemble de diagrammes suivant (qui n'a pas de sens dans la méthode d'Abrikosov puisque tout diagramme où on renormalise la ligne électronique est nul lors du passage à la limite $\lambda \rightarrow \infty$)



Cet ensemble de diagrammes vérifie presque les équations de Nagaoka. Le "presque" vient du fait qu'il donne dans le découplage, le terme $-\frac{J}{N} n_k^0 \sum_{\ell} \Gamma_{k\ell}$ au lieu de $-\frac{J}{N} (n_k - \frac{1}{2}) \sum_{\ell} \Gamma_{k\ell}$ qu'on trouve dans les équations de Nagaoka. Il résulte qu'on ne voit pas à quels diagrammes d'Abrikosov correspond le découplage de Nagaoka, dès qu'on quitte les termes les plus divergents. De toutes façons, on sait maintenant que le découplage de Nagaoka n'est pas satisfaisant :



En utilisant la solution exacte des équations de Nagaoka (Herman-Ploomfield⁽⁹⁾ ; Zittartz⁽¹⁰⁾), Zittartz⁽¹¹⁾ a pu calculer exactement la susceptibilité magnétique statique et trouve pour $T \rightarrow 0$:

$$\chi - \chi_p \approx \frac{1}{3} \frac{g^2 \mu_B^2}{kT} \left(S(S+1) - \left(S + \frac{1}{2} \right) \right)$$

résultat visiblement absurde pour un spin $\frac{1}{2}$, où on obtient une susceptibilité suivant une loi de Curie, avec constante de Curie négative. Ce fait est peut-être en relation avec le problème que nous venons de signaler.



CHAPITRE III

ABSENCE DE RENORMALISATION POUR LES PROPAGATEURS VIRTUELS.

1 - Introduction.

L'origine de ce travail est une remarque que nous avons faite en étudiant la méthode d'Abrikosov⁽⁶⁾. Rappelons qu'il s'agit de calculer la matrice T pour l'interaction de Kondo

$$H_{\text{int}} = - 2J \vec{s} \cdot \vec{S} = - \frac{J}{N} \sum_{kk'} c_{ks}^+ c_{k's'} \vec{\sigma}_{ss'} \cdot \vec{S}.$$

Afin de pouvoir utiliser la théorie des perturbations, Abrikosov représente le spin localisé S à l'aide d'un champ de fermions virtuels :

$$\vec{S} = \sum_{\sigma\sigma'} a_{\sigma}^+ \vec{S}_{\sigma\sigma'} a_{\sigma'}$$

le champ virtuel étant soumis à la contrainte "une seule particule virtuelle présente dans le système". La matrice T peut alors se développer en série de diagrammes par les techniques standard. La contrainte "une seule particule virtuelle présente" s'exprime en introduisant un potentiel chimique λ pour les particules virtuelles et en prenant pour chaque diagramme $D(\lambda)$ la limite :

$$D_0 = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} e^{\beta\lambda} D(\lambda). \text{ (Tout ceci est repris en détail à l'annexe 1).}$$

Par exemple, si on écrit tous les diagrammes connexes contribuant à T jusqu'au 4ème ordre en J, on obtient :

$$T = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} e^{\beta\lambda} \left[\begin{array}{c} \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} \\ + \text{Diagram 5} + \text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} + \text{Diagram 9} \\ + \text{Diagram 10} + \text{Diagram 11} + \text{Diagram 12} \end{array} \right]$$

où $\longrightarrow$ est la ligne électronique et $\rightsquigarrow$ la ligne virtuelle.



Notre remarque est alors la suivante : on peut, dans un but didactique, utiliser cette méthode pour calculer l'amplitude de diffusion créée par un potentiel indépendant du spin (diffusion normale par opposition à diffusion de Kondo). Il suffit pour cela d'introduire un champ de fermions virtuels à un seul état, puis d'écrire le potentiel

$$\mathcal{V} = \frac{V}{N} \sum_{kk's} c_{ks}^+ c_{k's} \quad , \text{ sous la forme}$$

$$\mathcal{V} = \frac{V}{N} \sum_{kk's} c_{ks}^+ c_{k's} a^+ a$$

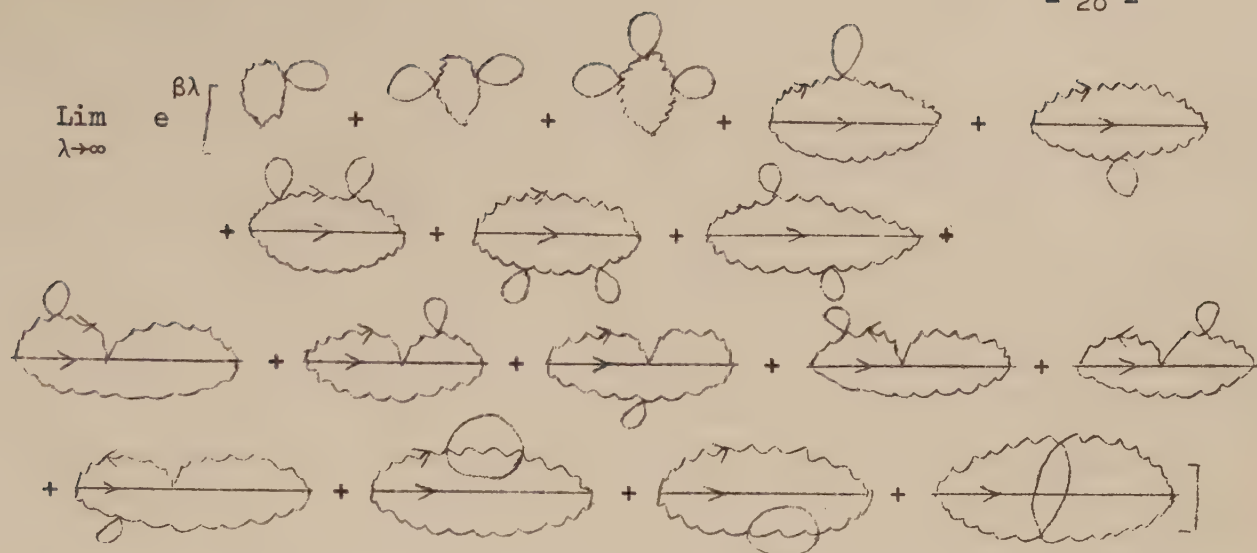
(où a^+ et a sont les opérateurs de création et de destruction du champ virtuel). On a affaire exactement aux mêmes diagrammes que précédemment, la seule (et importante) différence étant l'apparition de coefficients numériques supplémentaires devant les diagrammes dans le cas de la diffusion de Kondo. De toutes façons, on s'attend à trouver, dans le cas de la diffusion normale, le résultat :

$$T = x + x \rightarrow x + x \rightarrow x \rightarrow x + x \rightarrow x \rightarrow x \rightarrow x + \dots$$

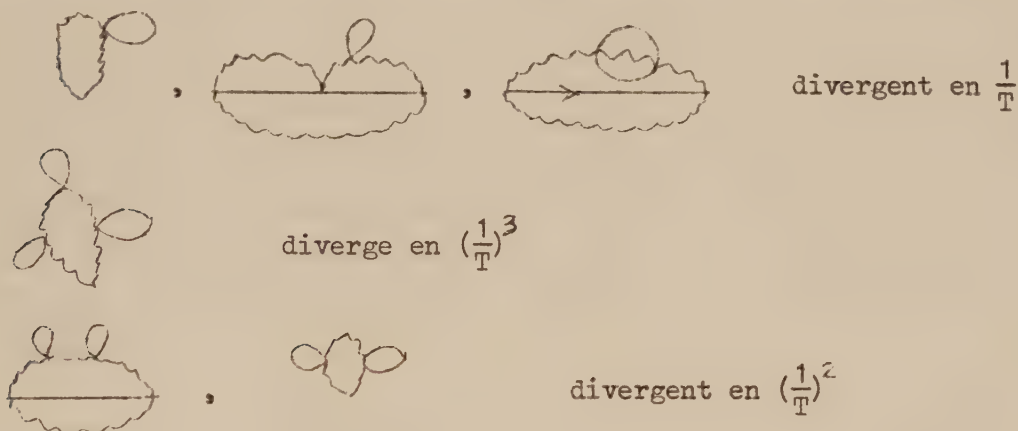
puisque c'est ce qu'on écrirait directement sans introduire de champ virtuel. Or si on se limite au 4ème ordre en V , on trouve seulement :

$$\begin{aligned} & x + x \rightarrow x + x \rightarrow x \rightarrow x + x \rightarrow x \rightarrow x \rightarrow x = \\ & \lim_{\lambda \rightarrow \infty} e^{\beta \lambda} \left(\begin{array}{c} \text{diagramme 1} + \text{diagramme 2} + \text{diagramme 3} + \text{diagramme 4} \\ + \text{diagramme 5} + \text{diagramme 6} + \text{diagramme 7} + \\ \text{diagramme 8} + \text{diagramme 9} + \text{diagramme 10} \end{array} \right) \end{aligned}$$

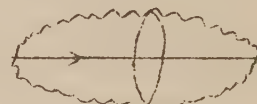
c'est à dire que seuls les diagrammes sans boucles électroniques donnent le résultat cherché. Mais en principe, devraient compter dans T les termes à boucles électroniques qui sont les suivants :



(Les termes de Hartree-Fock que nous voyons apparaître dans le cas de la diffusion normale sont nuls dans le cas de la diffusion de Kondo, par suite de la parité de spin). Ces termes supplémentaires apparaissent donc comme indésirables. Ils le deviennent plus encore si on les calcule : par exemple :



Seul le dernier diagramme de la matrice T à l'ordre 4, soit



ne diverge qu'en $\text{Log } T$.

Afin d'éclaircir ce petit mystère, évidemment dû à une mauvaise interprétation de la méthode d'Abrikosov, nous l'avons reprise depuis le début et nous avons fait les constatations suivantes :



1 - 1) Equivalence avec l'approche de Balian, Bloch et de Dominicis
(26 - 27 - 28) (en abrégé B. B. D.).

La méthode d'Abrikosov⁽⁶⁾ (introduction d'une particule virtuelle, puis projection sur les états à une seule particule) est simplement une façon d'écrire des diagrammes de type Feynmann dans le cas où la présence d'opérateurs de spin S_x, S_y, S_z empêche l'application usuelle du théorème de Wick. On doit, après avoir écrit un diagramme dans cette méthode, prendre la limite $\lambda \rightarrow \infty$ (correspondant à la projection sur les états à une seule particule virtuelle). Mais on peut prendre cette limite soit après avoir calculé le diagramme (c'est à dire après intégration sur les temps intermédiaires ou sommation sur les fréquences) soit avant de le calculer. Dans ce dernier cas, on constate que ce diagramme d'Abrikosov se trouve transformé en une somme de diagrammes qui sont exactement ceux qu'on obtiendrait directement par l'approche "cylindrique" de B. B. D. Comme cette approche est bien plus simple, puisqu'elle évite l'introduction du champ virtuel, puis la projection sur les états à une seule particule virtuelle, nous l'emploierons pour l'exposé, nous bornant à montrer l'équivalence entre les deux méthodes à l'annexe 1. Enfin, dans l'exposé, nous signalerons ce qui nous semble un gros avantage de la méthode B. B. D.: elle permet de faire instantanément l'intégration sur les temps intermédiaires, évitant les fastidieuses sommations sur les fréquences des diagrammes usuels (de type Feynmann).

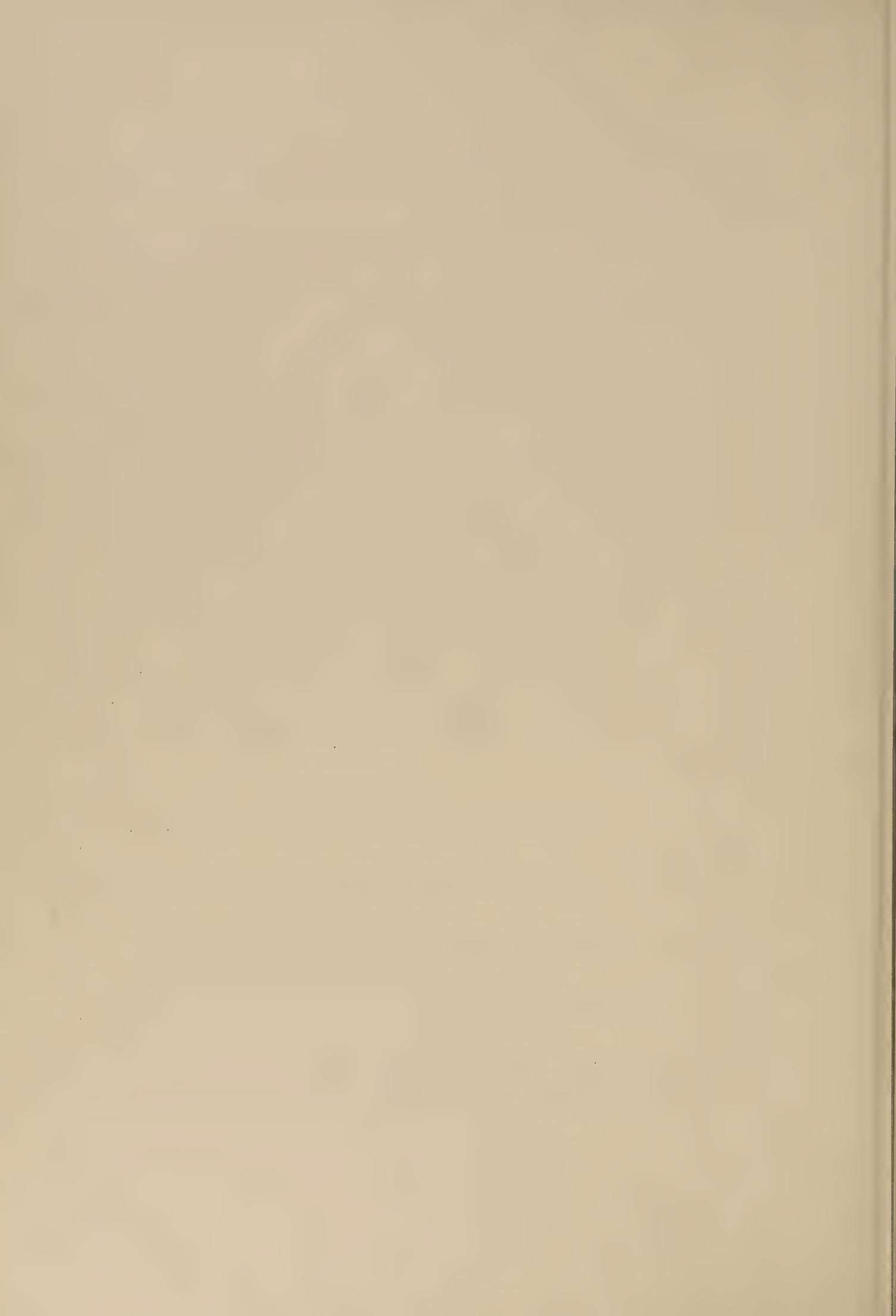
1 - 2) Existence d'un dénominateur $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$ dans la définition de la fonction de Green (et de la matrice T)

Nous verrons que la matrice T apparaît sous la forme d'un quotient

$$T(t - t') = \frac{\langle \theta(t - t') \rangle}{\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle} \quad \text{où}$$

$$S(\beta) = e^{\beta H_0} e^{-\beta H}$$

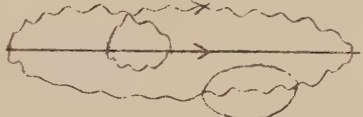
On peut alors avoir l'impression (fausse) que le dénominateur $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$ est simplifié par les diagrammes non connexes du numérateur, c'est à dire qu'on

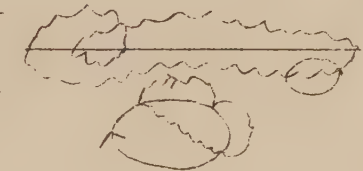


a, de façon classique :

$$\frac{\langle \theta(t - t') \rangle}{\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle} = \langle \theta(t - t') \rangle_c$$

Or il se trouve, voir annexe 1, que seuls les diagrammes à une seule boucle virtuelle ont une limite non nulle pour $\lambda \rightarrow \infty$. Par exemple,

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} e^{\beta\lambda} \left[\text{diagramme} \right] \neq 0$$


$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} e^{\beta\lambda} \left[\text{diagramme} \right] = 0$$


On ne doit donc considérer que les diagrammes à une seule boucle virtuelle (donc connexes) ce qui fait que la matrice T s'écrit :

$$T(t - t') = \frac{\langle \theta(t - t') \rangle_c}{\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_c}$$

ce qui empêche d'appliquer le "linked cluster theorem". Toute cette question est expliquée en détail à l'annexe 1. Ce fait a d'ailleurs été clairement mis en évidence par Keiter⁽¹⁶⁾ et nous l'avons repris ici pour la commodité de lecture. La prise en compte de ce dénominateur a plusieurs conséquences :

1 - 2) 1. Diffusion normale.

La difficulté signalée au début venait de l'application erronée de la méthode d'Abrikosov. Si on tient compte du dénominateur $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$, on peut voir, dans le cas de la diffusion normale, que les boucles (électroniques) du numérateur et du dénominateur se simplifient. C'est à dire que dans ce cas, on a une sorte de "linked" cluster theorem" qui s'écrit de la façon suivante :



$$T = \frac{\langle \theta \rangle}{\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle} \quad \text{avec boucles électroniques}$$

$$T = \langle \theta \rangle \quad \text{sans boucles électroniques.}$$

Pour la diffusion normale, on n'a donc à ne considérer que les diagrammes sans boucles électroniques, qui donnent le bon résultat.

1 - 2) 2. Diffusion de Kondo.

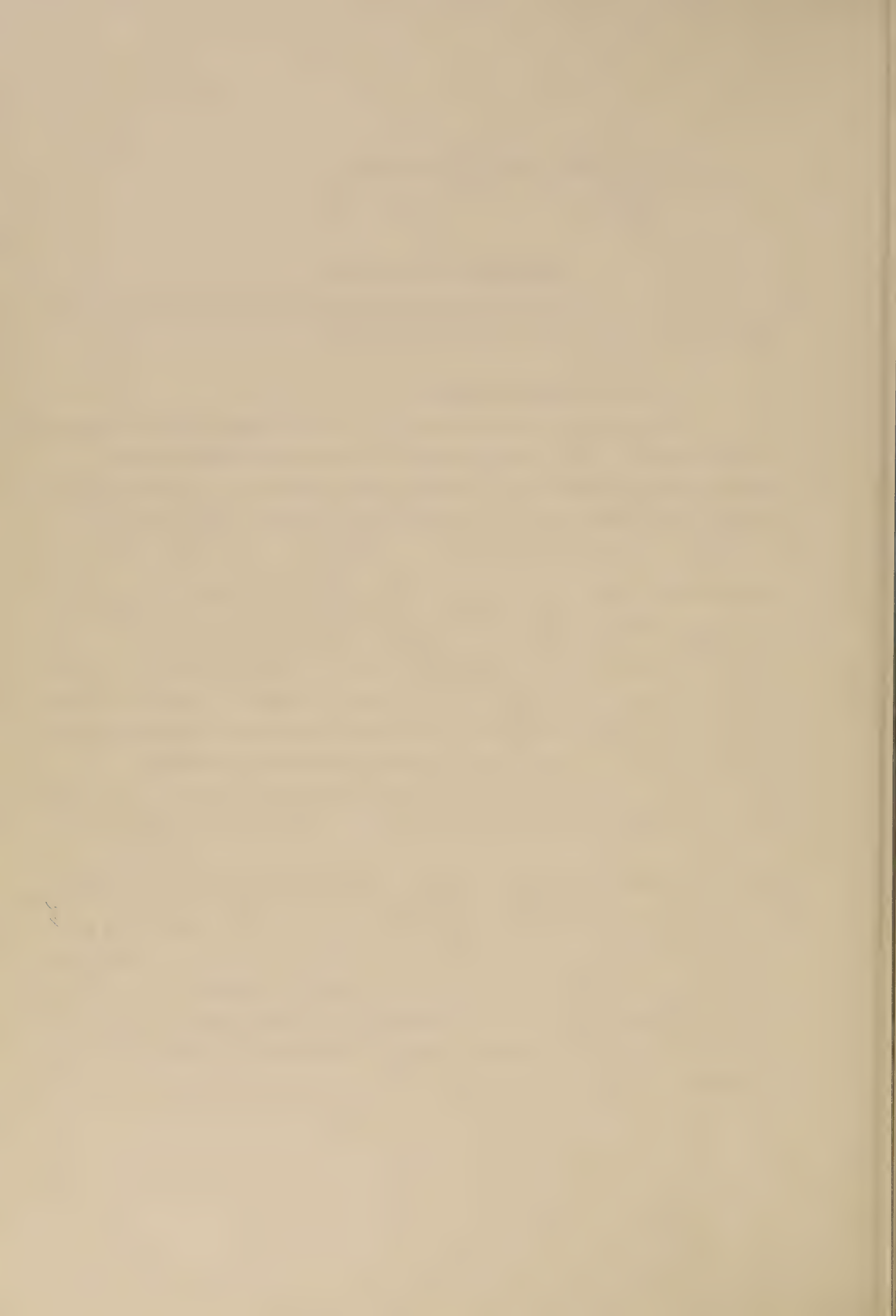
Il est facile de voir qu'il n'y a plus une simplification totale entre le dénominateur $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$ et les boucles électroniques du numérateur $\langle \theta \rangle$. Mais par contre, le cas de la diffusion normale suggère que ce dénominateur va jouer un rôle important. Il faut en principe développer séparément $\langle \theta \rangle$ et $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$ et prendre le quotient $T = \frac{\langle \theta \rangle}{\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle}$. La situation paraît

très inquiétante parce que $\langle \theta \rangle$ et $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$ ont des divergences en β , β^2 , ..., β^N , ... Pour $\langle \theta \rangle$ cela se voit en calculant les diagrammes avec boucles électroniques, pour $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$, on peut tout de suite remarquer que

$\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle = e^{-\beta \Delta F}$, d'où les divergences (ΔF est la variation d'énergie libre du système perturbé par rapport au système non perturbé). Le calcul explicite des diagrammes montre d'ailleurs qu'il existe en outre des divergences logarithmiques en $\text{Log } \beta$, ce qui donne en général des termes divergents en

$\beta^p (\text{Log } \beta)^q$ pour les diagrammes avec boucles électroniques. On peut alors craindre qu'il ne subsiste de telles divergences dans le quotient $T = \frac{\langle \theta \rangle}{\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle}$.

Nous avons observé comment les choses se passaient pour les premiers termes et constaté que les divergences en $\frac{1}{T}$ disparaissaient. (Par contre, les divergences en $\text{Log } T$ subsistent). Nous avons pu montrer que ceci était général : on peut dire grossièrement que dans la diffusion de Kondo, les boucles se simplifient partiellement. Le dénominateur $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$ se simplifie totalement avec les boucles du numérateur produisant des divergences en $\frac{1}{T}$. Mais dans $\langle \theta \rangle$ subsistent des termes à boucles ne produisant pas de divergences en $\frac{1}{T}$, mais seulement des divergences en $\text{Log } T$.



Notre conclusion est que l'oubli du dénominateur $\langle \beta \rangle$, même si finalement les choses ne sont guère changées dans l'état actuel de la théorie, était une erreur théorique grave. En particulier, nous avons montré qu'il n'était pas question de renormaliser la ligne virtuelle, comme on le propose parfois, car il s'agit précisément des termes divergents en β , qui se simplifient avec le dénominateur $\langle \beta \rangle$. Finalement, les boucles électroniques ne peuvent intervenir que dans la renormalisation des vertex et, comme nous le verrons, avec un coefficient effectif et non pas le coefficient usuel affecté au diagramme.

Nous allons maintenant exposer la méthode B. B. D. car elle permet de mettre en évidence très facilement les divergences en β dont nous avons parlé.

2 - Méthode de Balian, Bloch et de Dominicis.

Son point de départ est constitué par deux articles de Bloch et de Dominicis^(26 - 27) étendant à température finie les résultats à température nulle de Goldstone⁽²⁹⁾, Hugenholtz⁽³⁰⁾ et Bloch⁽³¹⁾. Ces articles ne concernaient que l'énergie et le potentiel de Gibbs. Balian et de Dominicis⁽²⁸⁾ ont alors étendu la méthode au calcul des fonctions de Green et ont précisé les méthodes de régularisation⁽³²⁾.

Nous allons énoncer les règles de calcul, telles qu'elles découlent de cette méthode appliquée à l'Hamiltonien de Kondo :

$$H = H_0 + H_{\text{int}}$$

$$H_0 = \sum_k \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}$$



Avant de poursuivre, nous attirons l'attention sur le fait suivant :

Kondo, Abrikosov et la plupart des gens écrivent l'interaction de Kondo sous la forme :

$$H_{\text{int}} = - 2 J_K \vec{s} \cdot \vec{S}$$

Nagaoka l'écrit sous la forme

$$H_{\text{int}} = - J_N \vec{s} \cdot \vec{S}.$$

Dans la suite, nous^{ne} considérerons pour simplifier qu'un spin localisé $S = \frac{1}{2}$.

On a alors intérêt à écrire l'interaction de Kondo sous la forme :

$$H_{\text{int}} = - 4j \vec{s} \cdot \vec{S},$$

de façon à ne faire apparaître dans les calculs que des matrices de Pauli, évitant bon nombre de **facteurs** $(\frac{1}{2})^P$ dans les coefficients des diagrammes. On aura donc, avec une interaction localisée à l'origine :

$$H_{\text{int}} = - \frac{j}{N} \sum_{\substack{kk' \\ ss'}} c_{ks}^+ c_{k's'} \vec{\sigma}_{ss'} \cdot \vec{S}$$

où maintenant $\vec{\sigma}$ et $\vec{S}$ sont des matrices de Pauli.

Si on cherche la fonction de Green à température finie :

$$G(k, s, t ; k', s', t') = \langle T_{\tau} (\tilde{c}_{ks}(t) \tilde{c}_{k's'}^{\dagger}(t')) \rangle$$

$$(\text{avec } \langle \dots \rangle = \frac{\text{Tr } e^{-\beta(H - \mu N)} \dots}{\text{Tr } e^{-\beta(H - \mu N)}})$$

on commence par l'exprimer en représentation d'interaction :

$$G(k, s, t ; k', s', t') = \frac{\langle T_{\tau} (c_{ks}(t) c_{k's'}^{\dagger}(t') \mathcal{I}(\beta)) \rangle_0}{\langle \mathcal{I}(\beta) \rangle_0}$$



$$\text{avec } \langle \dots \rangle_o = \frac{\text{Tr } e^{-\beta(H_o - \mu N)} \dots}{\text{Tr } e^{-\beta(H_o - \mu N)}}$$

(Dans la suite nous omettrons l'indice o de $\langle : \rangle_o$)

$\mathcal{J}(\beta)$ est l'opérateur $\mathcal{J}(\beta) = e^{\beta H_o} e^{-\beta H}$

On peut écrire cette matrice soit sous sa forme symétrisée :

$$\mathcal{J}(\beta) = T_{\tau} \exp \left[- \int_0^{\beta} H_{\text{int}}(t') dt' \right] \text{ avec}$$

$$H_{\text{int}}(t) = e^{tH_o} H_{\text{int}} e^{-tH_o}$$

soit sous sa forme non symétrisée :

$$(\beta) = \sum_{p=0}^{\infty} (-) \int_0^{\beta} dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{p-1}} dt_p H_{\text{int}}(t_1) \dots H_{\text{int}}(t_p)$$

$\beta > t_1 > \dots > t_p > 0$

La forme symétrisée conduit aux diagrammes du type Feynmann-Matsubara-Abrikosov lorsque H_{int} ne comporte que des opérateurs de création et de destruction.

La forme non symétrisée conduit aux diagrammes B. B. D. (Dans ce cas l'opérateur T_{τ} se borne à placer les opérateurs $c_{ks}(t)$ et $\bar{c}_{k's'}(t')$ à leur bonne place dans le développement de $\mathcal{J}(\beta)$). On voit tout de suite que dans le cas B. B. D. on n'aura aucune difficulté pour prendre en compte les opérateurs de spin $S_x(t_i), S_y(t_j), S_z(t_k)$. En effet, ils apparaissent dans $\mathcal{J}(\beta)$ selon un ordre bien déterminé et constituant seulement un coefficient indépendant des temps intermédiaires. Au contraire, dans l'approche symétrisée conduisant aux diagrammes de Feynmann-Matsubara, les opérateurs de spin $S_x(t_i), S_y(t_j), S_z(t_k)$ n'ont plus un ordre bien déterminé et apparaissent non pas comme un coefficient, mais comme une fonction des temps intermédiaires d'où la nécessité d'introduire le champ virtuel pour exprimer cette fonction des temps intermédiaires. On comprend donc bien pourquoi, $\langle \theta \rangle$ et $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$ se développent directement en série de diagrammes B. B. D., dont voici les règles de calcul :



2 - 1) Diagrammes de $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$

Ils sont directement issus du théorème de Wick (pour les opérateurs de fermions seuls) appliqué au développement non symétrisé de $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$

Graphiquement ces diagrammes sont constitués de la façon suivante :

On dessine une ligne ondulée (que nous continuerons à appeler ligne virtuelle par abus de langage) partant du point $t = 0$ et arrivant au temps $t = \beta$.

Sur cette ligne, on place les interactions aux temps $0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n < \beta$.

Enfin, on joint ces interactions de toutes les façons possibles par des boucles électroniques orientées.

Exemple :



La valeur D du diagramme est le produit des trois nombres :

$$D = S(D) \times C(D) \times I(D)$$

$S(D)$ est le coefficient de spin du diagramme

$C(D)$ est son coefficient normal

$I(D)$ est sa valeur intégrée.

Le coefficient de spin $S(D)$ s'obtient de la façon suivante : à chaque vertex, on associe un indice cartésien $\alpha, \beta, \dots, \omega$. (L'indice cartésien prend les 3 "valeurs" possibles x, y, z . Avec cette notation, on aura par exemple :

$$\vec{S} \cdot \vec{\sigma} = S_x \sigma_x + S_y \sigma_y + S_z \sigma_z = \sum_{\alpha} S_{\alpha} \sigma_{\alpha}). \text{ Alors le coefficient de spin est}$$

$$S(D) = \sum_{\alpha, \beta, \dots, \omega} \frac{1}{2} \text{Tr}(S_{\alpha} S_{\beta} \dots S_{\omega}) \times \text{Tr}(\sigma_{\alpha_1} \dots \sigma_{\omega_1}) \times \dots \times \text{Tr}(\sigma_{\alpha_N} \dots \sigma_{\omega_N})$$

où la trace sur le spin localisé S est prise en suivant la ligne virtuelle, tandis que les N traces sur les matrices de Pauli sont prises en suivant les N boucles électroniques. Le facteur $\frac{1}{2}$, que nous avons intégré dans le coefficient de spin, vient du fait que l'état non perturbé est dégénéré 2 fois, à cause des



2 états possibles du spin localisé $\frac{1}{2}$. En effet, on a :

$$\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle = \frac{\text{Tr} e^{-\beta(H_0 - \mu N)} \mathcal{J}(\beta)}{\text{Tr} e^{-\beta(H_0 - \mu N)}} = \frac{1}{2} \frac{\text{Tr} e^{-\beta(H_0 - \mu N)} \mathcal{J}(\beta)}{\text{tr} e^{-\beta(H_0 - N)}}$$

où le symbole tr représente la trace électronique par opposition au symbole Tr, représentant la trace totale. Cette forme permet d'appliquer le théorème de Wick de façon usuelle aux opérateurs électroniques seuls. Ce facteur $\frac{1}{2}$ est évidemment le facteur $\frac{1}{2S+1}$ d'Abrikosov pour un spin localisé de longueur $\frac{1}{2}$. A titre d'exemple, on a, pour le diagramme dessiné plus haut :

$$S(D) = \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \alpha_5 \alpha_6 \alpha_7} \frac{1}{2} \text{Tr}(S_{\alpha_1} S_{\alpha_2} S_{\alpha_3} S_{\alpha_4} S_{\alpha_5} S_{\alpha_6} S_{\alpha_7}) \text{Tr}(\sigma_{\alpha_1} \sigma_{\alpha_3}) \times$$

$$\text{Tr}(\sigma_{\alpha_2} \sigma_{\alpha_4} \sigma_{\alpha_5}) \times \text{Tr}(\sigma_{\alpha_6} \sigma_{\alpha_7})$$

$C(D)$ est le coefficient normal du diagramme et vaut $(-)^{p+1} \times (-\frac{j}{N})^p = (-)^1 (\frac{j}{N})^p$ où p est le nombre d'interactions et l le nombre de boucles fermées. Dans notre exemple, nous avons :

$$C(D) = (\frac{j}{N})^7 (-)^3$$

Enfin, on obtient la valeur intégrée $I(D)$ de la façon suivante : on considère que la ligne virtuelle oriente les temps intermédiaires. A chaque ligne électronique montante, partant de t_i et arrivant en t_j , on associe le propagateur :

$$g^+(t_j - t_i) = \sum_k (1 - n(\epsilon_k)) e^{-\epsilon_k(t_j - t_i)}$$

où on compte l'énergie ϵ_k par rapport au niveau de Fermi. A chaque ligne descendante, on associe le propagateur :

$$g^-(t_j - t_i) = - \sum_k n(\epsilon_k) e^{-\epsilon_k(t_j - t_i)}$$



Enfin, on intègre sur les temps intermédiaires de 0 à β , en respectant les positions relatives sur la ligne virtuelle. Sur notre exemple, ceci nous donne :

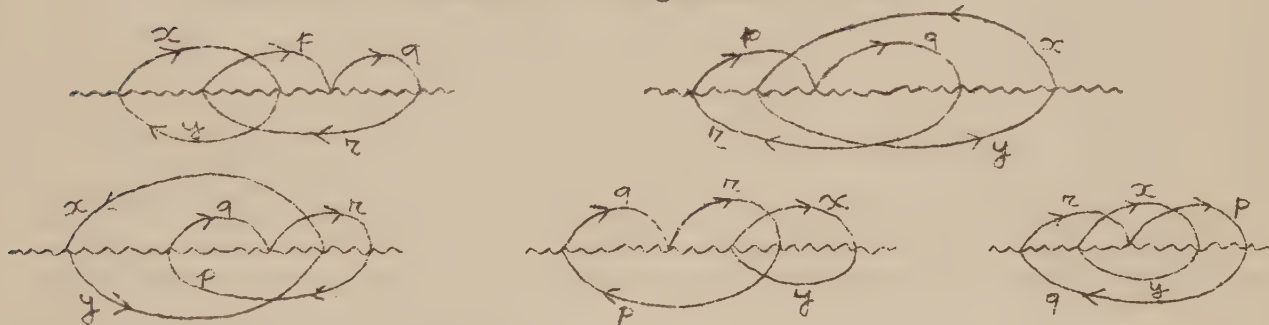
$$I(D) = \int_{0 < t_1 < \dots < t_7 < \beta} dt_1 \dots dt_7 \ g^+(t_3 - t_1) \ g^-(t_1 - t_3) \ g^+(t_4 - t_2) \ g^+(t_5 - t_4)$$

$$g^-(t_2 - t_5) \ g^+(t_7 - t_6) \ g^-(t_6 - t_7)$$

Ces intégrations sur les temps intermédiaires sont élémentaires mais fastidieuses. Un gros avantage de la méthode B. B. D. est qu'il existe une façon instantanée de les faire. Pour l'expliquer sans risque de confusion, il nous faut commencer par rappeler la notion de famille de diagrammes équivalents.

2 - 1) 1. Familles de diagrammes équivalents.

Considérons la famille de diagrammes suivante :



On voit qu'ils sont obtenus à partir du premier par des permutations circulaires sur les temps intermédiaires : c'est une famille de diagrammes équivalents. L'intérêt des diagrammes équivalents est le suivant :

- Ils ont tous le même coefficient de spin puisqu'on fait simplement une permutation circulaire des opérateurs de spin S_i sous le signe Tr .

- Leur somme est égale à la contribution de l'un quelconque d'entre eux calculé en y remplaçant l'intégration

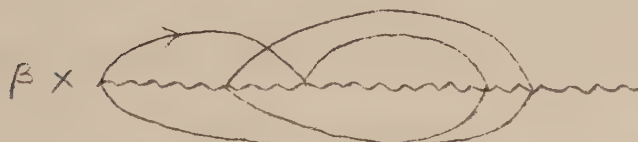
$$\int_{0 < t_1 < t_2 < \dots < t_p < \beta} dt_1 \ dt_2 \ \dots \ dt_p \quad \text{par} \quad \int_{t_1 < t_2 < \dots < t_p < t_1 + \beta} dt_2 \ \dots \ dt_p$$



(ce qui revient à prendre le temps initial t_1 égal à 0). Ainsi la somme de nos 5 diagrammes est égale au choix à

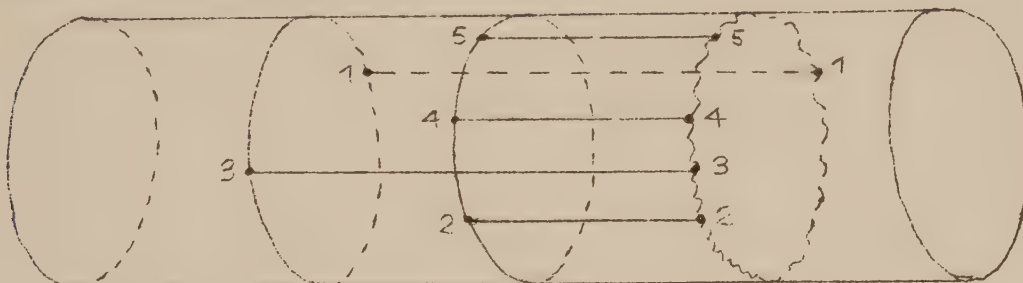


ou



... etc

Si tous les diagrammes équivalents de la famille sont distincts on peut les regrouper en un diagramme unique, dessiné sur un cylindre de circonférence β . Ainsi nos 5 diagrammes équivalents se regroupent sur le cylindre pour donner le diagramme unique suivant :



On voit en effet que le diagramme plan



considéré comme une fonction de ses temps intermédiaires est égal au signe près à celui dessiné sur le cylindre

si l'on prend comme propagateur sur le cylindre uniquement la fonction

$(1 - n(x)) e^{-xt}$ et des lignes tournant toujours dans le même sens (parce que les lignes descendantes $-n(x) e^{-xt}$ du diagramme plan peuvent s'écrire

$-(1 - n(x)) e^{(\beta - x)t}$ et peuvent ainsi être dessinées comme des lignes montantes sur le cylindre). Remarquons que l'égalité en question n'a lieu que si les arcs électroniques entre deux interactions successives sont toujours inférieurs à β (Pour pouvoir dessiner plus commodément les lignes électroniques et la ligne virtuelle sur le cylindre, on les a décalées et on a indiqué les interactions entre les lignes électroniques et la ligne virtuelle par des génératrices rectilignes du cylindre). Reste la question du signe. Le diagramme plan a pour signe $(-)^{p+1}$. Pour que le diagramme cylindrique ait finalement le même signe, compte tenu de la suppression de la distinction entre lignes montantes et



descendantes, il faut affecter au diagramme cylindrique le signe $(-)^{N+p+1}$ où N est le nombre total de spires électroniques, p le nombre d'interactions et 1 le nombre de boucles électroniques fermées. Si maintenant on intègre les temps intermédiaires sur la spire virtuelle, on aura bien le diagramme



c'est à dire la somme des diagrammes équivalents de la famille.

Si tous les diagrammes équivalents de la famille ne sont pas tous distincts, il faut introduire des coefficients de symétrie pour corriger les duplications.

Ainsi le diagramme



est identique à son diagramme

équivalent



avec un coefficient $\frac{1}{2}$.

; il sera donc représenté sur le cylindre

Finalement on peut résumer les règles de construction et de calcul des diagrammes cylindriques de la façon suivante :

- Sur le cylindre, tracer une spire virtuelle (faisant un seul tour) et 1 boucles électroniques, faisant chacune un nombre quelconque de tours, toujours dans le même sens.

- Joindre les spires électroniques et la spire virtuelle par des lignes d'interactions, de telle façon que l'arc de ligne électronique entre 2 interactions successives soit toujours inférieur ou égal à β .

- Associer à chaque ligne électronique d'énergie ϵ_k allant de t_i en t_j le propagateur $(1 - n(\epsilon_k)) e^{-\epsilon_k(t_j - t_i)}$. La valeur D du diagramme est le produit

$$D = S(D) C(D) I(D)$$

$S(D)$ est son coefficient de spin, dont la définition est identique à celle des diagrammes plans.

$C(D)$ est son coefficient normal contenant maintenant le coefficient de symétrie $\frac{1}{S}$ qui corrige les duplications :

$$C(D) = \frac{1}{S} \left(-\frac{j}{N}\right)^p (-)^{N+p+1} = \frac{1}{S} \left(\frac{j}{N}\right)^p (-)^{N+1}$$

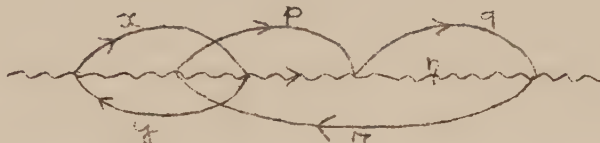


Enfin, $I(D)$ est sa valeur intégrée qu'on obtient en intégrant les temps intermédiaires sur la ligne virtuelle.

La représentation cylindrique est donc très commode, puisqu'elle permet de regrouper de nombreux diagrammes en un seul. Mais nous allons voir que la représentation plane a un gros avantage : elle permet d'écrire directement le résultat de l'intégration sur les temps intermédiaires grâce aux "valeurs associées."

2 - 1) 2. "Valeur associée" à un diagramme

Soit le diagramme :



On lui associe une "valeur associée" $\Delta(D)$ par la formule :

$$\Delta(D) = \frac{1}{\mathcal{O}} \operatorname{Res}_{\eta=0} \frac{e^{\beta\eta}}{\eta} \frac{(1 - n_x) (1 - n_p) (1 - n_q) (-n_y) (-n_r)}{(x + \eta - y)(x + p + \eta - y - r) (p + \eta - r) (q + \eta - r)}$$

On voit que le numérateur est simplement le produit des facteurs de Fermi associés aux lignes montantes et descendantes, tandis que le dénominateur est simplement le produit des énergies entre les interactions, en affectant à la ligne virtuelle "montante" une énergie η . $\mathcal{O}$ est l'ordre du pôle $\eta = 0$ ($\mathcal{O} = 1$ dans notre exemple).

L'intérêt des valeurs associées est le suivant : la somme des valeurs intégrées d'une famille de diagrammes équivalents est égale à la somme des valeurs associées aux diagrammes de cette famille, multipliée par β .

(Attention : pour un diagramme isolé, la valeur associée, multipliée par β , est différente de la valeur intégrée). Pour la démonstration de cette propriété on pourra se reporter à la référence (26), en prenant garde au fait que notre paramètre η est égal au paramètre $-\varepsilon$ de cette référence. On voit donc qu'il suffit de dessiner les diagrammes pour avoir le résultat de l'intégration sur les temps. C'est un avantage pratique important par rapport à la méthode consistant à faire des sommations sur les fréquences, en employant des diagrammes du type Feynmann-Matsubara-Abrikosov, d'autant plus que cette méthode se généralise au calcul des fonctions de Green, comme nous allons voir maintenant.



2 - 2) Diagrammes pour la matrice T.

La fonction "matrice T" s'écrit, en représentation d'interaction :

$$T(k, s, t ; k', s', t') = \frac{\langle T_{\tau} \{ (H_{\text{int}}, c_{ks})_t (H_{\text{int}}, \bar{c}_{k's'})_{t'} \mathcal{F}(\beta) \} \rangle}{\langle \mathcal{F}(\beta) \rangle} = \frac{\langle \theta \rangle}{\langle \mathcal{F}(\beta) \rangle}$$

Graphiquement les diagrammes contribuant à $\langle \theta \rangle$ sont constitués de la façon suivante : on trace la ligne virtuelle allant de 0 à β . Sur cette ligne, on place les interactions aux temps $t_1 < t_2 < \dots < t_n < \beta$ ainsi que 2 interactions "extérieures" aux temps t et t' . On joint les interactions de toutes les façons possibles par des lignes électroniques, étant entendu qu'il arrive une ligne électronique au temps t' et qu'il part une ligne électronique du temps t .

Exemple :



La valeur D du diagramme est le produit de 3 nombres :

$$D = S(D) \quad C(D) \quad I(D)$$

Les règles de calcul sont analogues aux précédentes.

Le coefficient de spin S(D) est égal à

$$S(D) = \sum_{\alpha, \beta, \dots, \omega} \frac{1}{2} \text{Tr } S_{\alpha} S_{\beta} \dots S_{\omega} \times \text{Tr } \sigma_{\alpha_1} \dots \sigma_{\omega_1} \times \dots \times \text{Tr } \sigma_{\alpha_N} \dots \sigma_{\omega_N}$$

$$\times \langle s | \sigma_{\alpha} \dots \sigma_{\omega} | s \rangle$$

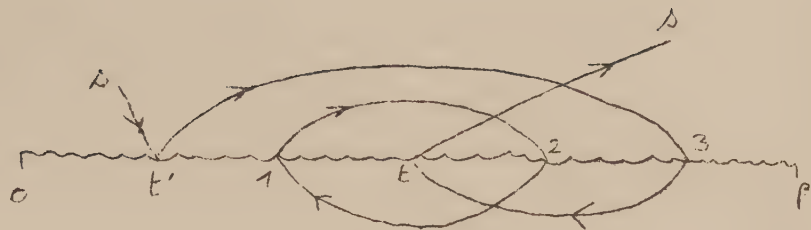
Les traces sont prises comme précédemment pour les boucles fermées. Par contre, pour la ligne électronique ouverte, il faut prendre le produit des matrices de Pauli telles qu'elles apparaissent en suivant cette ligne, en valeur moyenne entre le spin électronique entrant le spin électronique sortant (d'ailleurs égal au spin entrant).

Comme précédemment, le coefficient normal du diagramme est $C(D) = (-\frac{j}{N})^p (-)^{p+1}$ avec les mêmes notations. Enfin, pour avoir la valeur intégrée I(D), il faut intégrer sur les temps intermédiaires en respectant leurs positions relatives (entre eux et par rapport aux temps extérieurs t et t')



Exemple :

Pour le diagramme



on a

$$S(D) = \sum_{\alpha' \alpha_1 \alpha \alpha_2 \alpha_3} \frac{1}{2} \text{Tr } S_{\alpha'} S_{\alpha_1} S_{\alpha_2} S_{\alpha_3} \text{Tr} \sigma_{\alpha_1} \sigma_{\alpha_2} \langle s | \sigma_{\alpha'} \sigma_{\alpha_3} \sigma_{\alpha} | s \rangle$$

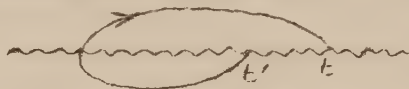
$$C(D) = \left(\frac{j}{N}\right)^5 (-)^1$$

$$I(D) = \int_0^{\beta} g^+(t_3 - t') g^-(t - t_3) g^+(t_2 - t_1) g^-(t_1 - t_2) dt_1 dt_2 dt_3$$

$$0 < t' < t_1 < t < t_2 < t_3 < \beta$$

2 - 2) 1. Diagrammes équivalents.

Ce type de diagramme présente une propriété surprenante pour les habitués des diagrammes de Feynmann-Matsubara-Abrikosov : si on considère un diagramme isolé (par exemple



) ce n'est

en général pas une fonction de $t - t'$. Le diagramme isolé doit donc se resommer avec d'autres pour former une fonction de $t - t'$, de symétrie fermion car il est bien évident à priori que T est une fonction $T(t - t')$ de symétrie fermion, c'est à dire que $T(t' - t) = -T(\beta - t + t')$. Balian et de Dominicis⁽²⁸⁾ ont montré que c'était la somme des diagrammes équivalents d'une même famille qui était une fonction de $t - t'$, de symétrie fermion. Par exemple :



est une fonction $\phi(t - t')$ telle que :

$$\phi(t' - t) = -\phi(\beta - t + t').$$

On peut alors, comme précédemment, regrouper chaque famille de diagrammes équivalents en un diagramme unique sur le cylindre (en prenant garde aux duplications).





$$T(i\omega) = \frac{1}{\beta} \left[\begin{array}{c} \text{diagram 1} + \text{diagram 2} \\ + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \text{diagram 5} \\ + \text{diagram 6} + \text{diagram 7} + \text{diagram 8} \\ + \dots \end{array} \right]$$

L'intérêt de ces diagrammes est le suivant : pour $\omega = (2n + 1)\pi T$, ils ont exactement les mêmes propriétés d'équivalence que les diagrammes fermés contribuant à $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$. On a donc tout de suite la transformée de Fourier des familles de diagrammes équivalents par la méthode des valeurs associées. Ainsi la valeur intégrée de la première famille d'ordre 3 est simplement :

$$I = \frac{1}{\beta} \text{Res}_{\eta=0} \frac{e}{\eta} \sum_{pq} \frac{(1 - n_q) (-n_p)}{(q + r - p) (q + r - i\omega)} + \frac{(1 - n_p) (-n_q)}{(p + \eta - i\omega) (p - q)} + \frac{(-n_p) (-n_q)}{(\eta - q + i\omega) (\eta - p + i\omega)}$$

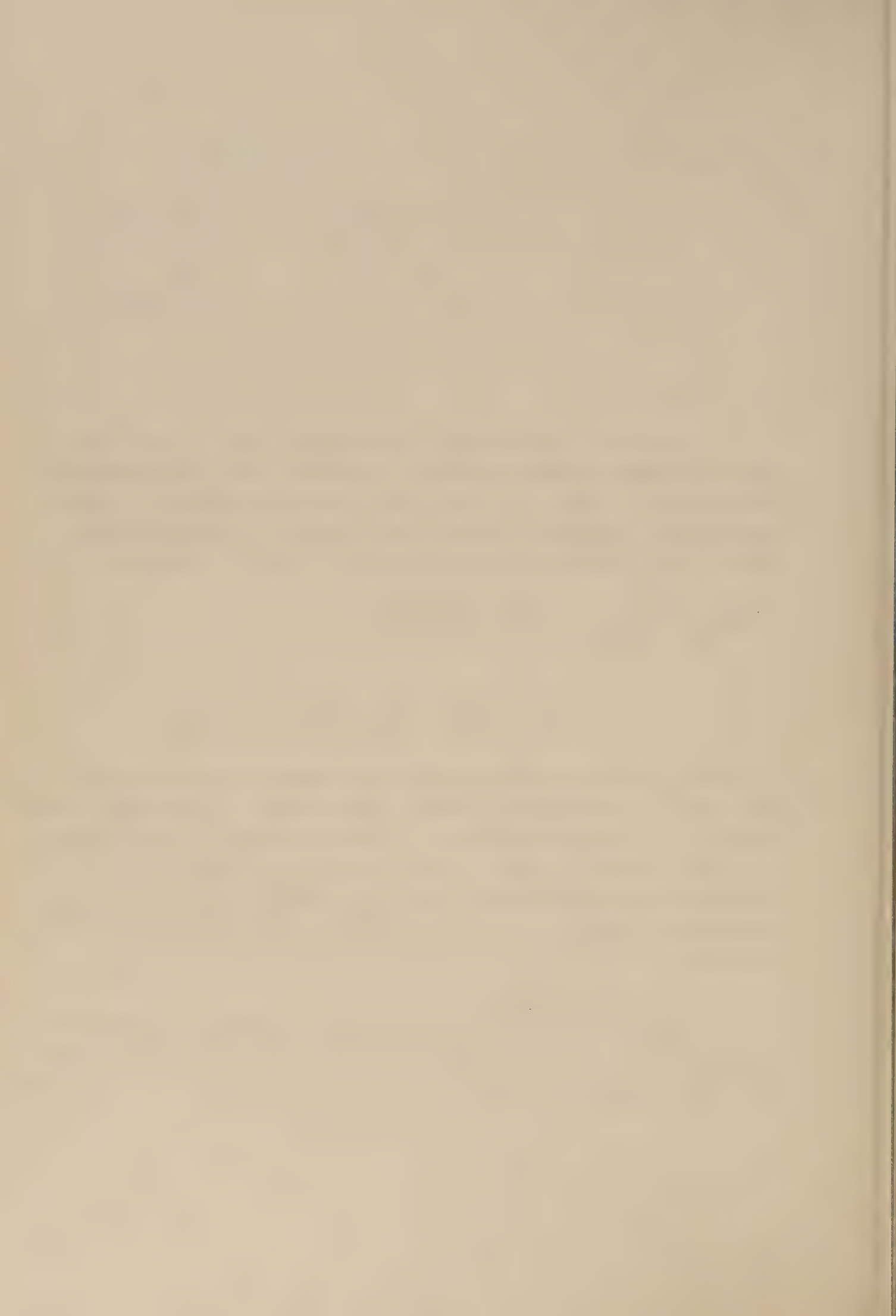
On a donc un procédé bien plus rapide que les sommations sur les fréquences pour prendre les transformées de Fourier. Mais attention : de même que la valeur associée à un diagramme contribuant à $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$ (multipliée par β) était différente de sa valeur intégrée, de même la valeur associée d'un diagramme contribuant à $\langle \theta \rangle$ n'est pas la transformée de Fourier de ce diagramme (qui n'est même pas en général une fonction de $t - t'$). On n'obtient le même résultat qu'en faisant la somme sur une famille complète de diagrammes équivalents.

2 - 3) Régularisation.

Enfin, il nous faut dire quelques mots du problème de la régularisation, qui se pose de toutes façons quelle que soit l'approche utilisée. Considérons par exemple le diagramme :



. Il a pour



valeur associée :

$$\Delta = \sum_{xyz} \frac{(1 - n_x) (1 - n_y) (-n_z)}{(y - z)^2 (x - i\omega)}.$$

On voit apparaître l'intégration $\sum_{yz} \frac{(1 - n_y)n_z}{(y - z)^2}$ qui n'a à priori

aucun sens, la fonction $\frac{1}{(y - z)^2}$ n'étant pas intégrable. Mais il est clair

qu'en calculant directement la transformée de Fourier de la famille engendrée par ce diagramme, qui est égale à :

$$D(i\omega) =$$


soit, en valeur intégrée :

$$I(i\omega) = \sum_{xyz} (1 - n_x) (1 - n_y) (n_z) e^{(z - y) t_3} e^{(i\omega - x)(t_2 - t_1)}$$

$$0 < t_1 < t_2 < t_3 < \beta$$

on n'a évidemment aucune difficulté d'intégration en x, y, z ; la difficulté vient du fait que la méthode des valeurs associées (comme d'ailleurs n'importe quelle méthode pratique) sépare en morceaux isolément non intégrables une somme initialement intégrable. La façon de tourner la difficulté est la suivante : si on ajoute à x, y, z , de petites valeurs imaginaires $i\xi, i\eta, i\zeta$, la transformée de Fourier $D(i\omega)$ devient une fonction $D(i\omega, i\xi, i\eta, i\zeta)$ régulière en ξ, η, ζ , ce qui fait que

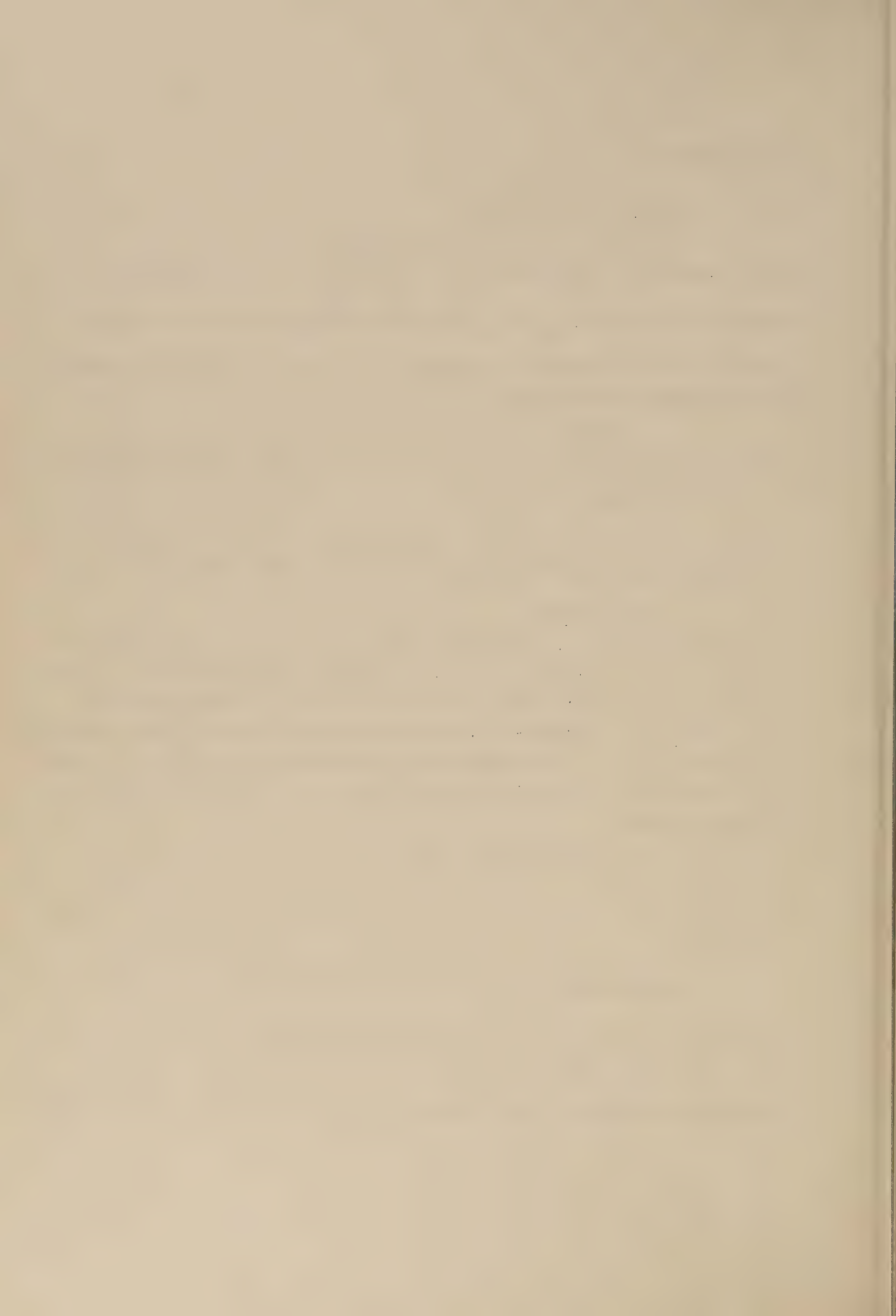
$$\lim D(i\omega, i\xi, i\eta, i\zeta) = D(i\omega)$$

$$\left. \begin{matrix} \xi \\ \eta \\ \zeta \end{matrix} \right\} \rightarrow 0$$

Corrélativement la valeur associée $\Delta(i\omega)$ devient :

$$\Delta(i\omega, i\xi, i\eta, i\zeta) = \sum_{xyz} \frac{(1 - n_x) (1 - n_y) (-n_z)}{(y - z + i(\eta - \zeta))^2 (x - i\omega + i\xi)}$$

Le problème est alors de trouver une procédure pour faire $\left. \begin{matrix} \xi \\ \eta \\ \zeta \end{matrix} \right\} \rightarrow 0$ de telle façon



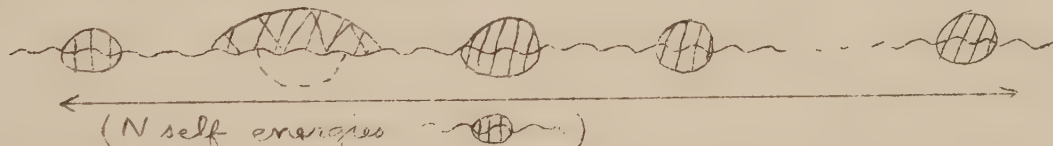
que simultanément tous les dénominateurs de toutes les valeurs associées aux diagrammes de la famille aient une partie imaginaire de signe bien défini. En effet, cela définit alors des distributions qui permettent de donner un sens à l'intégration. Il faut remarquer qu'il peut exister de nombreuses procédures différentes, qui donnent évidemment toutes le même résultat tout en changeant le déroulement des calculs. Ce problème a été étudié en détail par Balian et de Dominicis.⁽³²⁾

3 - Non renormalisation de la ligne virtuelle.

On a : $T = \frac{\langle 0 \rangle}{\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle}$. Il est clair que $\langle 0 \rangle$ et $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$ ont tous deux des divergences en β , ce qui se voit facilement en calculant les valeurs associées. Par exemple, le diagramme suivant, contribuant à $\langle 0 \rangle$



$$\Delta = \frac{1}{0} \text{Res}_{\eta=0} \frac{e^{\beta\eta}}{\eta} \frac{(1 - n_x)(1 - n_y)(-n_z)}{(x - i\omega + \eta)(y + \eta - z)} \text{ qui diverge en } \beta. \text{ D'une façon générale, tout diagramme de } \langle 0 \rangle \text{ portant } N \text{ self energies pour la ligne virtuelle aura une valeur associée divergente en } \beta^N$$



De même tout diagramme de $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$ portant N self-energies sur la ligne virtuelle aura une valeur associée divergente en β^N , ce qui conduit à une divergence en β^{N+1} pour la valeur intégrée.

Ces diagrammes à boucles électroniques risquent donc d'être dangereux pour la matrice T, s'ils ne s'éliminent pas, par une sorte de "linked cluster theorem". Afin de mieux comprendre comment les choses se passent, nous allons commencer par étudier le problème de la diffusion normale, où l'on est sûr à priori que les boucles se simplifient. Nous allons observer comment s'effectue cette simplification, ce qui nous permettra de constater qu'elle n'a plus lieu



que partiellement dans le cas de la diffusion de Kondo (Mais heureusement d'une façon telle que toutes les divergences en β se trouvent tout de même simplifiées).

3 - 1) Etude de la diffusion normale.

On emploie la même méthode avec simplement $H_{int} = \frac{V}{N} \sum_{kk'} c_k^+ c_{k'}$

(on prend des électrons sans spin pour simplifier). Nous avons affaire exactement aux mêmes diagrammes que précédemment, la seule (et importante) différence étant qu'il n'y a plus de coefficient de spin. A un diagramme $D_K = S(D) C(D) I(D)$ de la diffusion de Kondo correspond exactement le même diagramme en diffusion normale, mais il a simplement pour valeur :

$$D_N = C(D) I(D)$$

3 - 1) 1. Diagrammes de $\langle \theta \rangle$ sans boucles électroniques.

Ils sont de la forme :



Pour l'ordre N , ils sont au nombre de $N!$ qui représentent simplement les $N!$ positions relatives des temps extérieurs t et t' et des $N - 2$ temps intermédiaires. Comme ils ont tous le même coefficient, on peut en faire la somme, ce qui fait disparaître les contraintes d'intégration. Finalement il ne reste qu'un seul diagramme dont on intègre librement tous les temps intermédiaires entre 0 et β . On a donc :

$$T_{\text{sans boucles}} = x + x \text{---} x + x \text{---} x \text{---} x + \dots \text{etc}$$

3 - 1) 2. Elimination des boucles

Considérons le diagramme  ; il fait partie d'une famille de diagrammes "semblables" où la boucle a toutes les positions possibles :



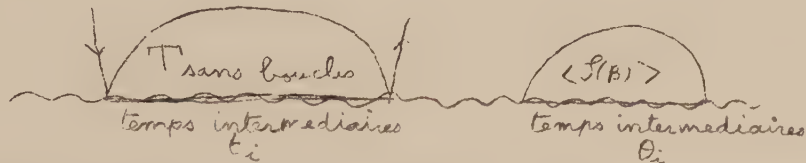


La somme de cette famille est évidemment égale au produit

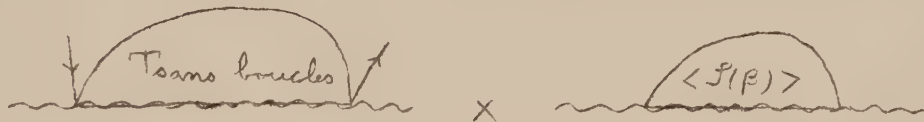


(puisque tous ces diagrammes ont le même coefficient). On peut répéter le même raisonnement avec un élément quelconque de $T_{\text{sans boucles}}$ et un élément quelconque de $\langle \mathcal{F}(\beta) \rangle$:

Le diagramme



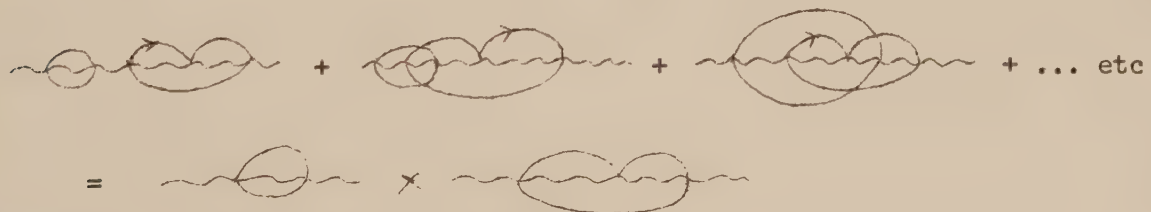
engendre une famille de diagrammes semblables : on donne aux temps θ_i toutes les positions relatives possibles par rapport aux t_i (sans changer les positions relatives des θ_i ni des t_i entre eux). Alors cette famille est simplement égale au produit



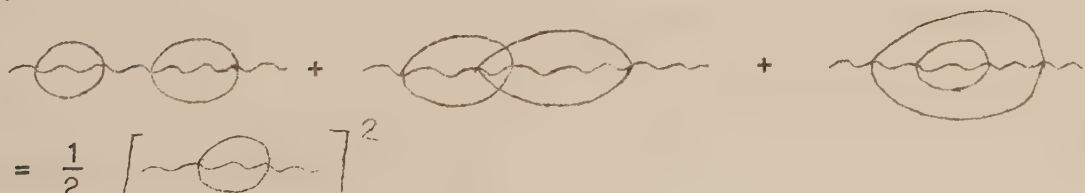
$$\text{Donc } T = \frac{\langle \theta \rangle}{\langle \mathcal{F}(\beta) \rangle} = T_{\text{sans boucles}}$$

3 - 1) 3. Regroupement exponentiel de $\langle \mathcal{F}(\beta) \rangle$

Dans la partie précédente on faisait glisser en bloc toutes les boucles de $\langle \mathcal{F}(\beta) \rangle$ par rapport à la ligne électronique ouverte. Faisons maintenant glisser entre elles les boucles de $\langle \mathcal{F}(\beta) \rangle$. On aura par exemple :



Mais :





En effet, les deux boucles sont indiscernables et en leur donnant toutes les positions relatives possibles, on compterait deux fois les mêmes diagrammes. D'une façon générale, si dans un même diagramme, on a p boucles identiques B_p , q boucles B_q ...etc, la somme de la famille de diagrammes semblables formés avec ces boucles est seulement :

$$\frac{1}{p!} (B_p)^p \times \frac{1}{q!} (B_q)^q \times \dots$$

on aboutit finalement à la formule bien connue :

$\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle = \exp \langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_c$ où dans notre cas les diagrammes connexes sont les diagrammes à une seule boucle.

Si nous avons rappelé ces résultats assez triviaux, c'est pour bien voir maintenant que dans le cas de la diffusion de Kondo le "linked cluster theorem" et le regroupement exponentiel n'ont plus lieu, du moins pas aussi simplement, ce qui est un aspect inhabituel de la théorie des perturbations.

3 - 2) Cas de la diffusion de Kondo

3 - 2) 1. Matrice T

A cause de la présence de coefficients de spin, on voit tout de suite que la factorisation n'a plus lieu, ou en tout cas, n'a plus lieu de façon aussi simple. Par exemple le cas d'ordre le plus bas qui se présente ne se factorise pas : en effet, considérons la famille de diagrammes semblables

$$\theta_1^4 = \begin{array}{c} \text{diagram 1} \\ \text{diagram 2} \\ \text{diagram 3} \\ \text{diagram 4} \\ \text{diagram 5} \end{array}$$

The diagrams are Feynman diagrams with wavy lines and loops. The coefficients are 18, -12, 18, -12, and 18 respectively.

Sous chaque diagramme, nous avons inscrit son coefficient de spin. Ils sont inégaux, on ne peut donc pas dire que cette somme est égale au produit

$$\text{diagram 1} \times \text{diagram 2} \quad . \text{ Mais on peut écrire cette somme}$$

sous la forme d'un produit et d'une correction :



$$\theta_1^4 = 18 \left(\text{diagram 1} \times \text{diagram 2} \right) - 30 \left(\text{diagram 3} + \text{diagram 4} \right)$$

Considérons alors le développement de la matrice T jusqu'au 4ème ordre :

$$T = \frac{\theta^2 + \theta^3 + \theta^4 + \dots}{1 + \mathcal{J}^2 + \dots}$$

où θ^2 , θ^3 , θ^4 , ... sont les termes d'ordre 2, 3, 4 en j de $\langle \theta \rangle$, $\mathcal{J}^2$ est le terme d'ordre 2 en j de $\langle \mathcal{J}^2 \rangle$; θ^2 et θ^3 ne pouvant pas porter de boucles électroniques, ne sont pas divergents en $\frac{1}{T}$. θ^4 comporte des termes sans boucles et des termes à une boucle pouvant diverger en $\frac{1}{T}$, soit $\theta^4 = \theta^4_0 + \theta^4_1$. Pour $t' < t$, θ^4_1 est l'expression que nous venons de factoriser "partiellement". On a donc, en explicitant partout les coefficients de spin

$$T = \frac{3 \text{diagram 1} + \theta^3 + \theta^4_0 + 18 \text{diagram 1} \times \text{diagram 2} - 30 (\text{diagram 3} + \text{diagram 4})}{1 + 6 \text{diagram 2}}$$

et on a au 4ème ordre :

$$T^4 = \theta^4_0 - 30 \left(\text{diagram 3} + \text{diagram 4} \right)$$

On voit que le terme divergent en β , soit $\text{diagram 1} \times \text{diagram 2}$

a été éliminé et que les seules boucles qui subsistent se trouvent en position non divergente en $\frac{1}{T}$, puisqu'elles renormalisent un vertex de la ligne électronique ouverte. Ces termes à boucles apportent tout de même des divergences en $\text{Log } T$. Le calcul de

$$T^4_{\text{boucle}} = -30 \left(\text{diagram 3} + \text{diagram 4} \right)$$

est fait l'annexe 3 et montre que ce terme se comporte de la façon suivante pour $T \rightarrow 0$

$$T^4_{\text{boucle}}(i\omega) \underset{T \rightarrow 0}{\approx} \int \frac{1}{x - i\omega} \times -60 \frac{j^4}{N} \rho^2 \text{Log } \frac{T}{D}$$



ρ étant la densité d'état constante dans l'intervalle $(-D, D)$.

Un calcul analogue pour les termes en j^5 et en j^6 montre que les divergences possibles en $\frac{j^5}{T}$ et en $j^6(\frac{A}{T^2} + \frac{B}{T})$ se compensent exactement. Nous avons pu montrer que c'était un résultat général : il y a compensation exacte des divergences en $\frac{1}{T}$ à tous les ordres (mais pas des divergences en $\log T$). La démonstration est donnée à l'annexe 2. Elle repose sur le fait suivant : les coefficients de spin des parties de diagrammes placés en position de renormalisation de la ligne virtuelle se factorisent. Par exemple :

$$S \left[\text{diagramme} \right] = S \left[\text{diagramme} \right] \times S \left[\text{diagramme} \right] \times S \left[\text{diagramme} \right]$$

Cette propriété se vérifie simplement en écrivant la définition des coefficients de spin. On peut alors répéter de façon systématique l'opération que nous avons faite pour les termes du 4ème ordre : on fait des factorisations partielles en corrigeant chaque fois l'erreur faite, les diagrammes de correction étant finalement uniquement des diagrammes où les boucles électroniques renormalisent seulement les vertex de la ligne électronique ouverte. Nous nous bornons ici à indiquer le résultat et à le commenter. On peut écrire :

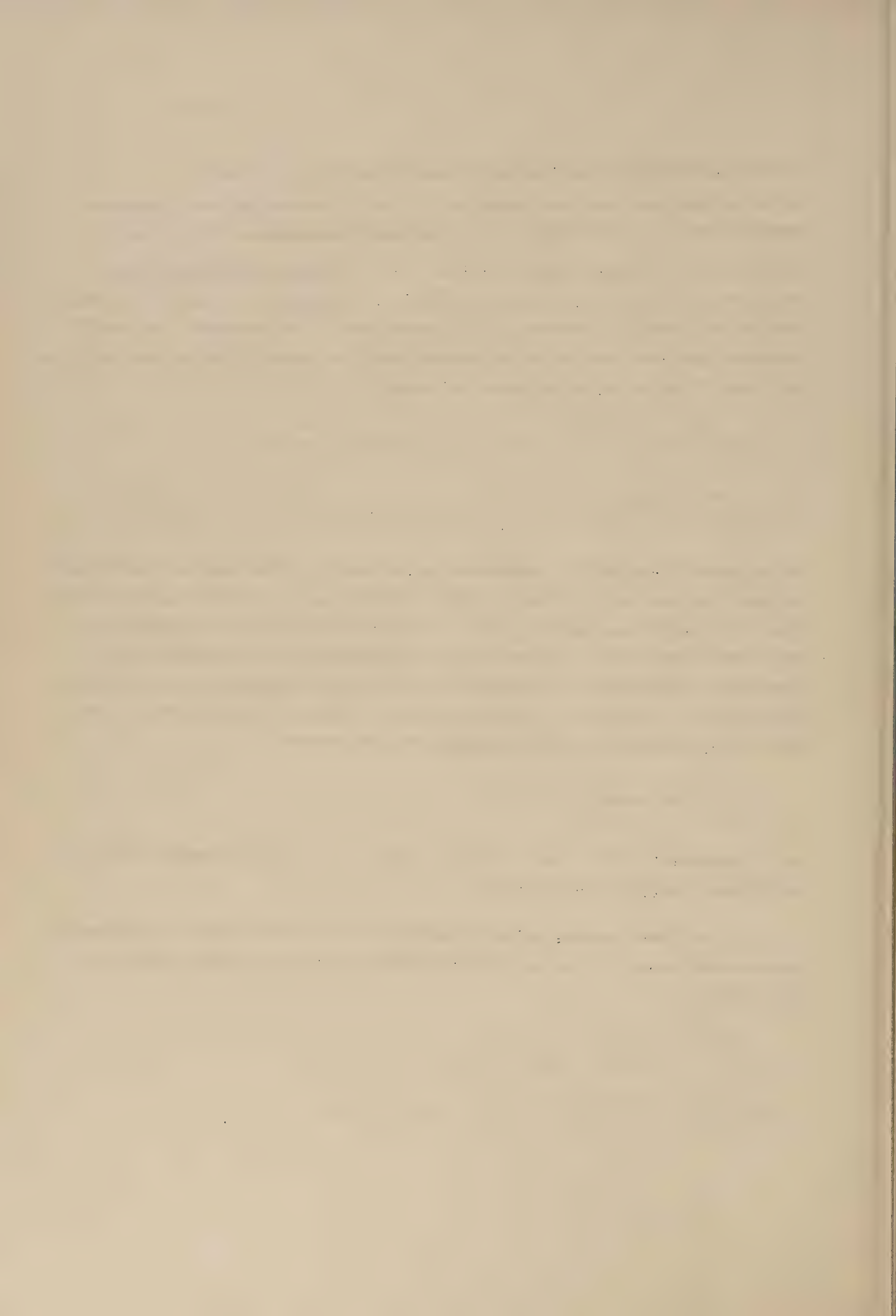
$$T = \frac{\langle \theta \rangle}{\langle \mathcal{F}(\beta) \rangle} = \langle \theta' \rangle$$

Les diagrammes de $\langle \theta' \rangle$ sont analogues à ceux de $\langle \theta \rangle$ mais évidemment avec des différences qui sont les suivantes :

- il ne faut compter que les diagrammes où les boucles sont en position de renormalisation de vertex (et pas de renormalisation de la ligne virtuelle).

Par exemple :

$$\begin{aligned} \text{diagramme} &\in \theta' \\ \text{diagramme} &\notin \theta' \end{aligned}$$



- Ces diagrammes n'ont pas leur coefficient de spin usuel mais un coefficient effectif. Par exemple, dans le cas des termes en j^4 , le coefficient effectif à associer aux diagrammes  et  est - 30, alors que leur coefficient de spin est - 12. La démonstration donnée à l'annexe 2 donne la façon d'obtenir le coefficient de spin effectif à associer aux diagrammes à boucles de θ' . Ce n'est malheureusement pas un procédé très simple, puisque ce coefficient effectif résulte de corrections successives associées à des factorisations partielles successives, en procédant de la même façon que pour le terme en j^4 .

3 - 2) 2. Exponentialisation de $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$.

De la même façon, la présence de coefficients de spin intempestifs empêche d'écrire :

$$\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle = \exp \langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_c.$$

On a par exemple au quatrième ordre, en considérant les termes à 2 boucles :

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_2^4 &= \text{diagram 1} \underset{9 \times 4}{+} \text{diagram 2} \underset{-6 \times 4}{+} \text{diagram 3} \underset{9 \times 4}{+} \\ &= 4 \times 9 \left[\text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \text{diagram 6} \right] - 4 \times 15 \text{diagram 7} \\ &= 9 \times 2 \left[\text{diagram 8} \right]^2 - 4 \times 15 \text{diagram 9} \end{aligned}$$

En répétant systématiquement ces factorisations partielles, on peut voir (annexe 2) qu'on a tout de même un théorème d'exponentialisation pour l'Hamiltonien de Kondo :

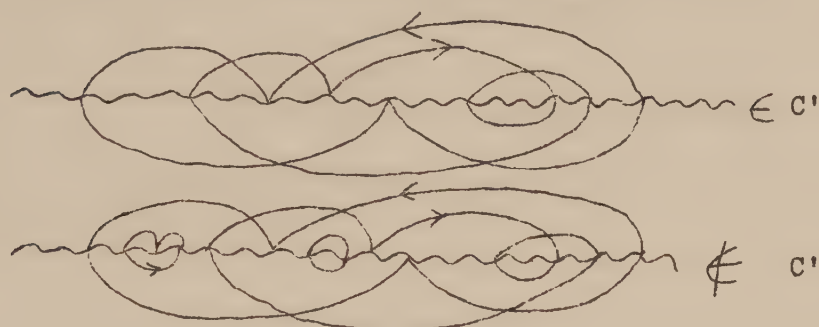
$$\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle = \exp \langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_{c'},$$

où l'ensemble c' est défini de la façon suivante :

Il est formé de diagrammes où aucune boucle ou ensemble de boucles n'est en



position de renormalisation de la ligne virtuelle. Par exemple :



Les coefficients de spin à associer à ces diagrammes ne sont pas les coefficients de spin usuels, mais des coefficients de spin effectif, définis de la même manière qu'en 321.

Ceci constitue donc une approche un peu différente de celle de de Dominicis et Toulouse⁽³³⁾ pour le même problème.

3 - 2) 3. Conclusion.

Nous avons donc montré que la présence du dénominateur $\langle \mathcal{F}(\beta) \rangle$ joue un rôle essentiel, puisqu'elle permet d'éliminer toutes les divergences en $\frac{1}{T}$ dans l'amplitude de diffusion. Elle élimine en même temps (c'est la même chose) toutes les boucles en position de renormalisation de la ligne virtuelle. L'idée selon laquelle on devrait renormaliser cette ligne sans tenir compte du dénominateur $\langle \mathcal{F}(\beta) \rangle$ est donc une idée fausse : c'est le principal résultat de ce travail. Si on veut renormaliser quelque chose, il faut se borner à renormaliser les vertex et alors la présence de coefficients de spin effectif joue peut-être un rôle important.



C H A P I T R E I V

APPROXIMATION D'INVARIANCE PAR TRANSLATION

ET EQUATION INTEGRALE APPROCHEE POUR LA MATRICE T.

Dans ce dernier chapitre, nous introduisons une nouvelle approximation, dite d'invariance par translation, qui permet d'obtenir une équation intégrale approchée pour la matrice T. Nous n'avons pas pu préciser de façon claire ce qu'impliquait l'approximation faite et nous n'avons pas étudié les propriétés résultant de cette équation. Nous y consacrons tout de même un chapitre car elle a au moins l'avantage d'introduire une renormalisation compatible avec l'approche diagrammatique B. B. D. Nous verrons en effet que l'équation somme tous les diagrammes, avec des coefficients évidemment faux (sinon elle serait exacte), mais on peut penser que cela vaut mieux que de sommer des diagrammes qui n'existent pas, ce qu'on fait en renormalisant la ligne électronique, comme cela a été expliqué à la fin du chapitre II.

Pour faciliter l'exposé, nous commencerons par expliquer la méthode dans le cas de la diffusion normale (elle est alors exacte). Nous la généraliserons ensuite (de façon approchée) au cas de la diffusion de Kondo.

1 - Diffusion normale.

On commence par considérer les diagrammes sans boucles. On montre ensuite que l'invariance par translation (qui est exacte pour la diffusion normale) entraîne l'élimination des boucles.

1 - 1) Diagrammes sans boucles électroniques.

On a, d'une façon générale :

$$T = \frac{\langle \theta \rangle}{\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle}$$



Ne considérant que les diagrammes sans boucles électroniques, cette formule se réduit à :

$$T_{\text{sans boucles}} = \langle \theta \rangle_{\text{sans boucles}}$$

On peut écrire cette formule d'une façon graphique, pour les termes d'ordre N :

$$(111) \quad T_{\text{sans boucles}}^N(t - t') = \begin{array}{c} \xrightarrow{t'} \\ \boxed{\Gamma_{\text{sans boucles}}^N} \\ \xrightarrow{t} \end{array}$$

où $\Gamma_{\text{sans boucles}}^N$ est le vertex (comprenant N! diagrammes) formé à l'aide de la ligne virtuelle et de la ligne électronique. On a vu à l'article 221 du chapitre III que les diagrammes B. B. D. se groupaient en familles de diagrammes équivalents, invariants par translation (alors qu'un diagramme B. B. D. isolé n'est pas invariant par translation). On peut donc supposer que le temps d'entrée t' de la ligne électronique est nul (pour $t' < t$) et la formule (111) se dessine alors sous la forme :

$$(112) \quad \left\{ \begin{array}{l} T_{\text{sans boucles}}^N(t) \\ 0 < t < \beta \end{array} \right. = \begin{array}{c} \xrightarrow{t} \\ \boxed{\Gamma_{\text{sans boucles}}^{(N-1)}} \\ \xrightarrow{0} \end{array}$$

Remarquons bien que la forme (112), bien que représentant exactement la même fonction que la forme (111) ne comporte plus que (N - 1) ! diagrammes : c'est une propriété des familles de diagrammes équivalents B. B. D., rappelée au paragraphe 211 du chapitre III. En faisant la somme à tous les ordres de la forme (112), soit $T_{\text{sans boucles}} = \sum_N T_{\text{sans boucles}}^{(N)}$, on obtient :

$$(113) \quad \left\{ \begin{array}{l} T_{\text{sans boucles}}(t) \\ 0 < t < \beta \end{array} \right. = \cancel{\frac{1}{t}} + 0 \quad \begin{array}{c} \xrightarrow{t} \\ \boxed{\Gamma_{\text{sans boucles}}} \\ \xrightarrow{t_1 \quad t_2} \end{array}$$

soit en explicitant :

$$\left\{ \begin{array}{l} T_{\text{s.b.}}(t) = \frac{V}{N} \delta(t - 0) + V \int_0^\beta d\tau g(\tau) \int_0^\beta dt_1 dt_2 \Gamma_{\text{s.b.}}(\tau, t; t_1, t_2) \\ 0 < t < \beta \end{array} \right.$$



Mais d'après (111)

$$T_{s.b.}(t - t') = \text{diagram with a box labeled } \Gamma_{s.b.} \text{ and arrows } t' \text{ and } t$$

On voit donc que l'invariance par translation donne 2 expressions au choix pour $T_{s.b.}$, qui se combinent pour donner une équation intégrale :

$$(114) \quad \left\{ \begin{array}{l} T_{s.b.} \\ 0 < t < \beta \end{array} \right. = \text{diagram with a crossed box} + \text{diagram with a semi-circle labeled } T_{s.b.}$$

soit en explicitant

$$\left\{ \begin{array}{l} T_{s.b.}(t) = \frac{V}{N} \delta(t - 0) + V \int_0^\beta d\tau g(\tau) T_{s.b.}(t - \tau) \\ 0 < t < \beta \end{array} \right.$$

Il faut maintenant s'affranchir de la condition $0 < t < \beta$, c'est à dire prolonger l'équation sur l'intervalle $-\beta < t < 0$. C'est d'ailleurs nécessaire pour avoir une équation intégrale fermée, car dans le deuxième membre, l'argument de $T_{s.b.}(t - \tau)$ appartient à l'intervalle $(-\beta, \beta)$.

Il est facile de prolonger l'équation grâce à la condition " $T_{s.b.}$ est de symétrie fermion" c'est à dire $T_{sb}(t - \beta) = -T_{sb}(t)$. Pour cela, on n'a qu'à imaginer qu'on prend la transformée de Fourier de l'équation (114),

$$\text{diagram with a semi-circle labeled } T_{s.b.} = \text{diagram with a crossed box} + \text{diagram with a semi-circle labeled } T_{s.b.}$$

comme $T_{s.b.}$ a une fréquence impaire, ainsi que la ligne électronique $\longrightarrow$ et $\times$ (représentant le peigne de Dirac de type fermion), l'énergie se conserve au vertex et on a bien invariance par translation. On peut donc dans l'équation (114) supprimer la condition $0 < t < \beta$ en la remplaçant simplement par " $T_{s.b.}$ est de symétrie fermion" ce qui conduit alors au résultat attendu :

$$T_{s.b.} = x + x \text{---} x + x \text{---} x \text{---} x + \dots$$



Si nous avons expliqué en détail cette question du prolongement de l'équation intégrale obtenue pour $0 < t < \beta$, c'est parce que nous verrons que c'est ce prolongement qui va introduire les divergences dans le cas de la diffusion de Kondo.

1 - 2) Diagrammes avec boucles électroniques.

Montrons maintenant comment la méthode entraîne l'élimination des boucles électroniques. Nous avons maintenant :

$$T = \frac{\langle \theta \rangle}{\langle \mathcal{F}(\beta) \rangle}$$

D'une façon générale $\langle \theta \rangle$ se développe en diagrammes sous la forme suivante :

$$(121) \quad \langle \theta \rangle = \begin{array}{c} t' \quad t \\ \boxed{\Gamma} \end{array} + \begin{array}{c} t' \quad t \\ \boxed{\Gamma} \end{array} \begin{array}{c} \tau \end{array} + \begin{array}{c} t' \quad t \\ \boxed{\Gamma} \end{array} \begin{array}{c} \tau \end{array} \begin{array}{c} \tau \end{array} + \begin{array}{c} t' \quad t \\ \boxed{\Gamma} \end{array} \begin{array}{c} \tau \end{array} \begin{array}{c} \tau \end{array} \begin{array}{c} \tau \end{array}$$

où $\begin{array}{c} \tau \end{array}$ est la "matrice T" pour la ligne virtuelle, définie par l'équation :

$$\begin{array}{c} \tau \end{array} = \begin{array}{c} \tau \end{array} + \begin{array}{c} \tau \end{array}$$

A cause de l'invariance par translation, la forme (121) peut se réduire, en faisant $t' = 0$ dans $\theta(t - t')$ (pour $t' < t$) à la forme :

$$(122) \quad \langle \theta \rangle(t) = \begin{array}{c} 0 \quad t \\ \boxed{\Gamma} \end{array} \begin{array}{c} \tau \end{array} \quad \text{soit}$$

$$\theta(t) = \begin{array}{c} \downarrow \uparrow \\ 0 \end{array} + \begin{array}{c} \downarrow \uparrow \\ 0 \end{array} \begin{array}{c} \tau \end{array} + \begin{array}{c} \nearrow \searrow \\ 0 \end{array} \begin{array}{c} \tau \end{array} \begin{array}{c} t \end{array} + \begin{array}{c} \nearrow \searrow \\ 0 \end{array} \begin{array}{c} \tau \end{array} \begin{array}{c} \tau \end{array} \begin{array}{c} t \end{array} + \begin{array}{c} \nearrow \searrow \\ 0 \end{array} \begin{array}{c} \tau \end{array} \begin{array}{c} \tau \end{array} \begin{array}{c} \tau \end{array} \begin{array}{c} t \end{array}$$



En comparant avec (121), on voit qu'on obtient l'équation intégrale

$$(123) \left\{ \begin{array}{l} \text{Diagramme } \theta \text{ sur une ligne } t \\ 0 < t < \beta \end{array} \right. = \text{Diagramme } \theta \text{ sur une ligne } 0 + \text{Diagramme } \theta \text{ sur une ligne } \tau + \text{Diagramme } \theta \text{ sur une ligne } \theta$$

Cette équation est très semblable à l'équation (114) obtenue pour les diagrammes sans boucles. La seule différence est que le deuxième membre $x = \text{Diagramme } \theta \text{ sur une ligne } 0$ de (114) est remplacé par le deuxième membre $\text{Diagramme } \theta \text{ sur une ligne } \tau + \text{Diagramme } \theta \text{ sur une ligne } \theta$, qui lui est proportionnel. La constante de proportionnalité est simplement :

$$C = 1 + \text{Diagramme } \theta \text{ sur une ligne } \tau = \langle \mathcal{L}(\beta) \rangle$$

et on retrouve bien à nouveau le résultat

$$T = \frac{\langle \theta \rangle}{\langle \mathcal{L}(\beta) \rangle} = \langle \theta \rangle_{\text{sans boucles}}$$

Ce paragraphe va pouvoir être répété pratiquement sans changement dans le cas de la diffusion de Kondo.

2 - Diffusion de Kondo.

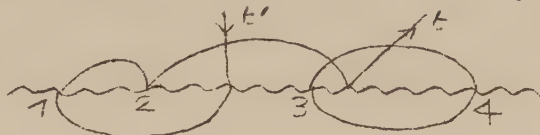
Si on veut appliquer la méthode précédente au cas de la diffusion de Kondo, il est nécessaire de généraliser θ en le considérant comme un opérateur, d'une façon analogue à la généralisation de Suhl⁽¹²⁾ pour la matrice T. Nous écrivons donc :

$$\ominus = \theta(t - t') + \theta^1(t, t') \bar{\sigma} \bar{S}$$

C'est θ que nous cherchons. Au contraire, θ^1 ne nous intéresse pas directement mais apparaîtra comme un intermédiaire de calcul indispensable. Après avoir défini θ^1 , nous traiterons le cas des diagrammes sans boucles électroniques, puis celui des diagrammes avec boucles électroniques et enfin nous commenterons l'équation intégrale obtenue.

2 - 1) Définition de θ^1 .

Considérons un diagramme quelconque contribuant à $\langle \theta \rangle$, par exemple :



Son coefficient de spin est :

$$S(D) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \\ \alpha \alpha'}} \text{Tr } S_{\alpha_1} S_{\alpha_2} S_{\alpha'} S_{\alpha_3} S_{\alpha} S_{\alpha_4} \text{Tr } \sigma_{\alpha_3} \sigma_{\alpha_4} \langle s | \sigma_{\alpha'} \sigma_{\alpha_1} \sigma_{\alpha_2} \sigma_{\alpha} | s \rangle$$

A cause de la quantité $\text{Tr } S_{\alpha_1} S_{\alpha_2} S_{\alpha'} S_{\alpha_3} S_{\alpha} S_{\alpha_4}$, seules contribuent les séquences $\alpha_1, \alpha_2, \alpha', \alpha_3, \alpha, \alpha_4$ telles que le produit des opérateurs de spin S sous le signe Tr soit un scalaire.

Nous généralisons cette définition en supprimant ce signe $\frac{1}{2} \text{Tr}$ de façon à avoir un coefficient de spin généralisé $\Sigma(D)$ qui soit un opérateur. Pour notre exemple, nous avons :

$$\Sigma(D) = \sum_{\substack{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \\ \alpha \alpha'}} S_{\alpha_1} S_{\alpha_2} S_{\alpha'} S_{\alpha_3} S_{\alpha} S_{\alpha_4} \text{Tr } \sigma_{\alpha_3} \sigma_{\alpha_4} \langle s | \sigma_{\alpha'} \sigma_{\alpha_1} \sigma_{\alpha_2} \sigma_{\alpha} | s' \rangle$$

qui par raison de symétrie s'écrit sous la forme :

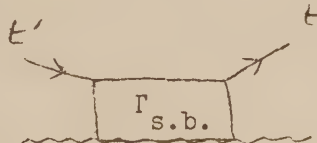
$$\Sigma(D) = S(D) + S^1(D) \bar{\sigma} \bar{S}$$

Cette définition va nous permettre de généraliser d'une façon approchée la méthode de l'équation intégrale.

2 - 2) Cas des diagrammes sans boucles.

On peut alors écrire d'une façon exacte, car cela résulte de la définition précédente :

$$(221) \quad \ominus = \theta(t - t') + \theta^1(t, t') \bar{\sigma} \bar{S} = \text{Diagramme}$$





Il est clair que θ est bien une fonction de $t - t'$ car les séquences $\alpha, \beta, \dots, \omega$ intervenant dans les coefficients de spin des diagrammes contribuant à θ sont telles que le produit des opérateurs de spin localisé est de type scalaire. Ce produit est donc invariant dans des permutations circulaires ce qui conduit à des familles de diagrammes équivalents ayant tous le même coefficient de spin, comme cela a été souligné en (211, chapitre III). Il n'en est malheureusement pas de même pour les diagrammes contribuant à θ^1 . Les séquences $\alpha, \beta, \dots, \omega$ sont telles que le produit $S_\alpha S_\beta \dots S_\omega$ est un opérateur S_x ou S_y ou S_z . Il résulte qu'une permutation circulaire sur un tel produit n'a pas de raison de laisser ce produit invariant. Par suite, les diagrammes contribuant à θ^1 ne se regroupent pas en familles de diagrammes équivalents, donc θ^1 n'est pas une fonction $\theta^1(t - t')$, comme on peut s'en convaincre par un développement des premiers termes en perturbations. L'approximation d'invariance par translation consiste à écrire, d'une façon approchée :

$\theta_1(t, t') \approx \theta_1(t - t')$, ce qui permet d'écrire une équation intégrale. En effet, supposant $t' < t$ et faisant $t' = 0$, on peut écrire

$$(222) \left\{ \begin{array}{l} \ominus_{s.b.}(t) = \text{diagramme} + \text{diagramme} \\ 0 < t < \beta \end{array} \right.$$

Décomposant cette équation en sa partie scalaire $\theta_{s.b.}$ et sa partie "opérateur" $\theta_{s.b.}^1$, nous obtenons, en tenant compte de (221)

$$(223) \left\{ \begin{array}{l} \text{diagramme} = 3j \text{diagramme} \\ \text{diagramme} = \text{diagramme} + j \text{diagramme} - 2j \text{diagramme} \\ 0 < t < \beta \end{array} \right.$$



soit en explicitant :

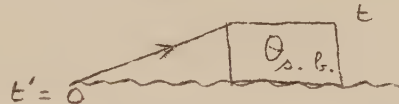
$$\left\{ \begin{array}{l} \theta_{s.b.}(t) = 3j \int_0^\beta du g(u) \theta_{s.b.}^1(t-u) \\ \theta_{s.b.}^1(t) = \frac{j}{N} \delta(t-0) + j \int_0^\beta du g(u) \theta_{s.b.}(t-u) \\ \quad - 2j \int_0^\beta du g(u) \theta_{s.b.}^1(t-u) \\ 0 < t < \beta \end{array} \right.$$

Il faut maintenant trouver des conditions aux limites permettant de s'affranchir de la condition $t > 0$. Pour commencer, il est clair que $\theta_{s.b.}(t)$ est de symétrie fermion. Quant à $\theta_{s.b.}^1(t)$, il n'a à priori aucune symétrie et on doit le décomposer en la somme d'une fonction de symétrie fermion et d'une fonction de symétrie boson (c'est à dire une fonction ϕ telle que $\phi(t-\beta) = \phi(t)$). On écrit donc :

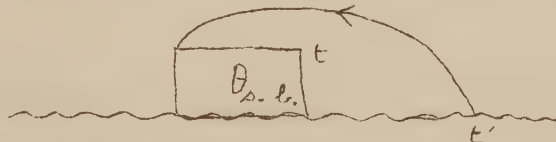
$$\theta_{s.b.}^1(t) = F_{\theta_{s.b.}^1}(t) + B_{\theta_{s.b.}^1}(t) \quad \text{avec}$$

$$F_{\theta_{s.b.}^1}(t) = -F_{\theta_{s.b.}^1}(t-\beta) \quad ; \quad B_{\theta_{s.b.}^1}(t) = B_{\theta_{s.b.}^1}(t-\beta)$$

On a alors envie de dire qu'à l'approximation d'invariance par translation, la contribution à $\theta_{s.b.}^1(t)$ qui est de la forme :



doit être de symétrie fermion. En effet, pour changer t en $-t$, il faut faire tourner le temps d'entrée (qui est nul dans ce diagramme) de façon à l'amener en avant du temps t , ce qui nous donne le diagramme équivalent :



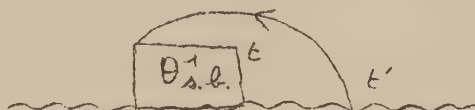
qui a le même coefficient de spin que le précédent puisque la séquence correspondant à la partie $\theta_{s.b.}$ du diagramme est scalaire.



Au contraire, si on considère la contribution à $\theta_{s.b.}^1(t)$ de la forme

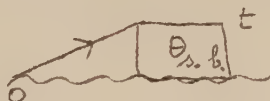


on voit qu'en changeant t en $-t$, c'est à dire en faisant passer le temps d'entrée en avant du temps de sortie, on a le diagramme :



qui a un coefficient de spin opposé au diagramme précédent. On a donc un changement de signe par rapport à ce qui se passe dans le cas fermion, d'où une symétrie boson.

Notons bien que cette question des symétries ne peut pas être rigoureusement démontrée en général, car l'hypothèse d'invariance par translation est contradictoire avec le fait que le coefficient d'un diagramme peut changer quand on effectue une rotation sur les temps du diagramme. Cependant, la définition des symétries que nous venons de donner est exacte au plus bas ordre. De plus, dans le cas d'une bande symétrique autour du niveau de Fermi, il devient très facile de prolonger l'équation (223) puisque θ et θ^1 ont des parités déterminées quand on échange t et t' (Annexe 4). On peut alors montrer (voir annexe 4) que les conditions de symétrie



est fermion,



est boson

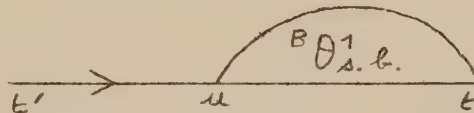
résultent rigoureusement de l'approximation d'invariance par translation. Nous prenons donc ces conditions, pensant qu'elles complètent naturellement l'approximation d'invariance par translation. On peut alors réécrire le système (223)



en séparant la partie fermion et la partie boson de $\theta_{s.b.}^1$:

$$\begin{aligned}
 (224) \quad & \left(\begin{array}{l} \text{Diagram 1: } \theta_{s.b.} \text{ from } 0 \text{ to } t \\ \text{Diagram 2: } F\theta_{s.b.}^1 \text{ from } 0 \text{ to } t \\ \text{Diagram 3: } B\theta_{s.b.}^1 \text{ from } 0 \text{ to } t \end{array} \right) = 3j \left(\begin{array}{l} \text{Diagram 4: } F\theta_{s.b.}^1 \text{ from } 0 \text{ to } t \\ \text{Diagram 5: } B\theta_{s.b.}^1 \text{ from } 0 \text{ to } t \end{array} \right) \\
 & \left(\begin{array}{l} \text{Diagram 6: } F\theta_{s.b.}^1 \text{ from } 0 \text{ to } t \\ \text{Diagram 7: } B\theta_{s.b.}^1 \text{ from } 0 \text{ to } t \end{array} \right) = \frac{1}{2} \frac{j}{N} \delta^F(t) + j \left(\begin{array}{l} \text{Diagram 8: } \theta_{s.b.} \text{ from } 0 \text{ to } t \\ \text{Diagram 9: } F\theta_{s.b.}^1 + B\theta_{s.b.}^1 \text{ from } 0 \text{ to } t \end{array} \right) \\
 & \left(\begin{array}{l} \text{Diagram 10: } B\theta_{s.b.}^1 \text{ from } 0 \text{ to } t \\ \text{Diagram 11: } F\theta_{s.b.}^1 + B\theta_{s.b.}^1 \text{ from } 0 \text{ to } t \end{array} \right) = \frac{1}{2} \frac{j}{N} \delta^B(t) - 2j \left(\begin{array}{l} \text{Diagram 12: } F\theta_{s.b.}^1 + B\theta_{s.b.}^1 \text{ from } 0 \text{ to } t \end{array} \right) \\
 & 0 < t < \beta
 \end{aligned}$$

Il faut maintenant nous affranchir de la condition $0 < t < \beta$. Le plus simple est d'imaginer qu'on prend la transformée de Fourier des équations. Alors pour certains termes l'invariance par translation est perdue par suite de la non conservation de l'énergie pour les vertex où l'énergie d'excitation est impaire ; par exemple, le terme



n'est pas invariant par translation car il arrive une ligne fermion et il part une ligne boson du vertex u . On rétablit tout de suite l'invariance par translation en ajoutant des lignes $\text{---} \xrightarrow{t'} \text{---} \xrightarrow{t} \text{---} = \text{signe}(t - t')$ de telle façon

que rien ne soit changé pour $t' = 0$ et $0 < t < \beta$ et que l'énergie soit conservée aux vertex intermédiaires.

Ainsi le terme précédent



est prolongé en :



Attention : Comme nous sommes limités typographiquement dans la représentation des lignes, nous prenons dans ce chapitre la ligne pointillée pour représenter sign t , alors que dans le chapitre précédent, la ligne pointillée était la ligne de fermeture $e^{i\omega t}$ permettant le calcul de la transformée de Fourier des diagrammes par la méthode des valeurs associées.



Donc en rétablissant partout l'invariance par translation comme il vient d'être expliqué, nous obtenons le système :

$$\begin{aligned}
 & \theta_{s.b.} = 3j \rightarrow \theta_{s.b.}^F - 3j \left(\theta_{s.b.}^B \right) \\
 (225) \quad & \theta_{s.b.}^F = \frac{1}{2} \frac{j}{N} \delta_F + j \rightarrow \theta_{s.b.} \\
 & \theta_{s.b.}^B = \frac{1}{2} \frac{j}{N} \delta_B + \frac{2}{3} \theta
 \end{aligned}$$

Il reste à éliminer $\theta_{s.b.}^1$ pour avoir une équation intégrale pour $\theta_{s.b.}$ seulement et nous obtenons :

$$\begin{aligned}
 & \theta_{s.b.} = 3 \frac{j^2}{N} x \rightarrow x + 3j^2 x \rightarrow x \rightarrow \theta_{s.b.} \\
 (226) \quad & - 2j^2 \left(\theta_{s.b.} \right)
 \end{aligned}$$

Nous allons montrer maintenant que l'approximation d'invariance par translation entraîne l'élimination totale des boucles électroniques, donc que l'équation (226) est vraie pour T (et non pas seulement pour $\theta_{s.b.}$)

2 - 3) Cas des diagrammes avec boucles.

On a :

$$T = \frac{\langle \theta \rangle}{\langle \mathcal{L}(\beta) \rangle}$$

et on cherche une équation intégrale pour $\langle \theta \rangle$. Comme en 12, $\ominus$ (définition en 21) se développe en diagrammes sous la forme suivante :



$$\ominus(t, t') = \text{diagram 1} + \text{diagram 2}$$

Diagram 1: A wavy line with a rectangular box labeled Γ on top. The left side of the box is labeled t' and the right side is labeled t .

Diagram 2: A wavy line with a semi-circular arc labeled τ on the left and a rectangular box labeled Γ on the right. The left side of the box is labeled t' and the right side is labeled t .

$$(231) \quad \text{diagram 3} + \text{diagram 4}$$

Diagram 3: A wavy line with a rectangular box labeled Γ on the left and a semi-circular arc labeled τ on the right. The left side of the box is labeled t' and the right side is labeled t .

Diagram 4: A wavy line with a semi-circular arc labeled τ on the left, a rectangular box labeled Γ in the middle, and another semi-circular arc labeled τ on the right. The left side of the box is labeled t' and the right side is labeled t .

où τ est la "matrice T" pour la ligne virtuelle. L'approximation d'invariance par translation permet d'écrire :

$$(232) \quad \ominus(t) = \text{diagram 5} + \text{diagram 6} + \text{diagram 7} + \text{diagram 8} + \text{diagram 9}$$

Diagram 5: A wavy line with a vertical line segment labeled t on the left.

Diagram 6: A wavy line with a vertical line segment labeled t on the left and a semi-circular arc labeled τ on the right.

Diagram 7: A wavy line with a vertical line segment labeled t on the left and a rectangular box labeled Γ on the right. An arrow labeled t points from the box to the right.

Diagram 8: A wavy line with a semi-circular arc labeled τ on the left, a rectangular box labeled Γ in the middle, and another semi-circular arc labeled τ on the right. An arrow labeled t points from the box to the right.

Diagram 9: A wavy line with a semi-circular arc labeled τ on the left, a rectangular box labeled Γ in the middle, and another semi-circular arc labeled τ on the right. An arrow labeled t points from the box to the right.

Comparant avec (231), on voit qu'on obtient l'équation intégrale :

$$(234) \quad \left\{ \begin{array}{l} \ominus(t) = \text{diagram 10} + \text{diagram 11} + \text{diagram 12} \\ 0 < t < \beta \end{array} \right.$$

Diagram 10: A wavy line with a vertical line segment labeled t on the left.

Diagram 11: A wavy line with a vertical line segment labeled t on the left and a semi-circular arc labeled τ on the right.

Diagram 12: A wavy line with a semi-circular arc labeled τ on the left, a rectangular box labeled Γ in the middle, and another semi-circular arc labeled τ on the right. An arrow labeled t points from the box to the right.

qui est analogue à l'équation (222) pour les diagrammes sans boucles électroniques, la seule différence étant que le deuxième membre de (222) est maintenant remplacé par le deuxième membre $\text{diagram 13} + \text{diagram 14}$

qui lui est proportionnel. La constante de proportionnalité est justement :

$$\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle = \text{diagram 15} + 1$$

Diagram 15: A wavy line with a semi-circular arc labeled τ on the left.

Les considérations de symétrie nécessaires au prolongement sont les mêmes qu'en 22 et finalement l'approximation d'invariance par translation conduit



pour T à l'équation intégrale :

$$\begin{aligned} \text{Diagram of } T &= 3 \frac{j^2}{N} x \text{---} x + 3j^2 x \text{---} x \text{---} \text{Diagram of } T \\ &\quad - 2j \text{---} \text{Diagram of } T \end{aligned}$$

soit en explicitant :

(236)

$$\begin{aligned} T(t - t') &= 3 \frac{j^2}{N} g(t - t') + 3j^2 \int_0^\beta dt_1 \int_0^\beta dt_2 g(t_1 - t') g(t_2 - t_1) T(t - t_2) \\ &\quad - 2j \operatorname{sign}(t' - t) \int_0^\beta dt_1 g(t_1 - t') \operatorname{sign}(t_1 - t') T(t - t_2) \operatorname{sign}(t - t_1) \end{aligned}$$

2 - 4) Remarques sur l'équation 236 et conclusion.

On va montrer que cette équation redonne bien la série des termes les plus divergents. Pour commencer, il est clair que le terme $3j^2 x \text{---} x \text{---} \text{Diagram of } T$ ne peut donner que des termes moins divergents, donc nous nous limitons à l'équation :

$$(241) \text{Diagram of } T_0 = 3 \frac{j^2}{N} x \text{---} x - 2j \text{---} \text{Diagram of } T_0$$

Si on développe cette équation en faisant des itérations, on a :

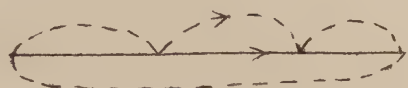
$$\begin{aligned} T_0^0 &= 3 \frac{j^2}{N} x \text{---} x = - \frac{3}{2} \frac{j^2}{N} \text{Diagram of } T_0^0 \\ T_0^1 &= 3 \frac{j^2}{N} x - 2j \text{Diagram of } T_0^1 \\ T_0^2 &= 3 \frac{j^2}{N} x (-2j)^2 \text{Diagram of } T_0^2 \\ &= - 3 \frac{j^2}{N} (-2j)^2 \text{Diagram of } T_0^2 \end{aligned}$$



Finalement, la solution T_0 de l'équation (241) valable pour les termes les plus divergents est simplement :

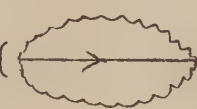
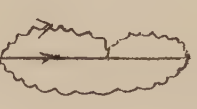
$$(242) \quad T_0 = - 3 \frac{j^2}{N} \left(\text{diagram 1} + 2j \text{diagram 2} + (2j)^2 \text{diagram 3} + \dots \right)$$





Ce développement est très analogue au développement de la fin du paragraphe 22 du chapitre II qui était valable pour les termes les plus divergents et s'écrivait :

$$T = 3j^2 \left(\text{diagram 1} + 4j \text{diagram 2} + (4j)^2 \text{diagram 3} + \dots + (4j)^N \text{diagram 4} + \dots \right)$$

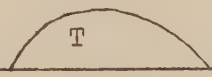


On voit donc facilement que (242) donne bien les mêmes termes les plus divergents : en effet, le fait de remplacer la ligne virtuelle d'Abrikosov par la ligne pointillée a deux conséquences :

- on a un changement de signe entre les deux approchées, parce que la ligne pointillée n'est pas issue du théorème de Wick (mais seulement de l'équation intégrale qu'il est plus intuitif de traiter par les diagrammes). Il ne faut donc pas associer de signe - aux boucles fermées pointillées.

- d'autre part, on a un changement de $(4j)^n$ en $(2j)^n$ qui résulte de la discontinuité à l'origine de $\text{sign} t$: elle vaut 2 contre 1 pour la discontinuité à l'origine de $G_\lambda = ((1 - n_\lambda) Y(t) - n_\lambda Y(-t)) e^{-\lambda t}$; on voit donc que l'équation (236) soit

$$\text{diagram T} = 3 \frac{j^2}{N} x \rightarrow x + 3j^2 x \rightarrow x \text{diagram T} - 2j \text{diagram T}$$


- redonne bien la série des termes les plus divergents
- introduit une sorte de renormalisation par l'intermédiaire du terme

$$3j^2 \quad x \text{---} x \text{---} \overbrace{\hspace{1cm}}^T$$

En effet, en itérant, ce terme va donner naissance à des diagrammes tels que :



D'une façon plus générale, la série des termes T_0 donnée par (242) engendre la série de termes moins divergents donnée par

$$- 2j(3j^2) \quad \text{---} \overbrace{\hspace{1cm}}^{T_0}$$

qui elle-même engendre la série encore moins divergente :

$$- 2j(3j^2)^2 \quad \text{---} \overbrace{\hspace{1cm}}^{T_0}$$

Bref, on voit de proche en proche, que ce terme de renormalisation engendre bien des termes de moins en moins divergents pour la matrice T , qui pourraient régulariser la série d'Abrikosov.

En conclusion, nous sommes en présence d'une équation intégrale dont l'approximation la plus basse est constituée strictement par les termes les plus divergents d'Abrikosov. Il est malheureusement clair qu'elle ne traite pas correctement les termes moins divergents (en particulier les diagrammes à boucles électroniques renormalisant les vertex ne sont pas pris en compte, alors qu'ils apportent des divergences, comme nous avons vu au chapitre précédent). Cependant, il faut souligner qu'il s'agit là de la difficulté essentielle du problème de l'effet Kondo, où seul un traitement exact pourrait donner toutes les divergences. Si donc on peut reprocher à cette équation de n'être pas exacte, on doit tout de même noter qu'elle est beaucoup plus proche de l'approche diagrammatique que par exemple le découplage de Nagao-ka. En effet, elle somme des diagrammes qui existent (mais avec des coefficients faux sinon elle serait exacte) alors qu'on peut avoir l'impression (voir la fin du chapitre II) que pour les termes les moins divergents, le découplage de Nagaoka revient à sommer des diagrammes qui n'existent pas (renormalisation du propagateur électronique). On peut donc penser que cette équation, plus proche de la réalité, pourrait donner un comportement acceptable à basse température pour les propriétés physiques du système.

La méthode d'Abrikosov.

=====

Son équivalence avec la méthode B. B. D.

1 - Présentation de la méthode d'Abrikosov.

Si l'on veut, à partir de l'interaction de Kondo, pour un spin localisé $\vec{S} = \frac{1}{2}$

$$H_{\text{int}} = - \frac{J}{N} \sum_{\substack{kk' \\ ss'}} c_{ks}^+ \vec{\sigma}_{ss'} c_{k's'} \quad \vec{S} = -J \vec{s} \vec{S}$$

($\vec{\sigma}$. matrices de Pauli)

calculer la fonction de Green à température finie :

$$G(k, s, t, ; k', s', t') = \langle T_{\tau} (\tilde{c}_{ks}(t) \tilde{c}_{k's'}^{\dagger}(t')) \rangle$$

on peut commencer par l'écrire en représentation d'interaction :

$$G = \frac{\langle T_{\tau} (c_{ks}(t) \bar{c}_{k's'}(t') \mathcal{J}(\beta)) \rangle_0}{\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_0}$$

où $\mathcal{J}(\beta) = T_{\tau} \exp \left(- \int_0^{\beta} H_{\text{int}}(\tau) d\tau \right)$ avec

$$H_{\text{int}}(\tau) = e^{\tau H_0} H_{\text{int}} e^{-\tau H_0}$$

Si alors on veut développer cette expression en diagrammes du type Feynmann-Matsubara-Abrikosov, on est bloqué parce que $\mathcal{J}(\beta)$ contient les opérateurs $S_x; S_y; S_z$ et qu'on n'a pas d'équivalent au théorème de Wick permettant de développer des expressions de la forme

$$\langle T_{\tau} (S_{\alpha}(t_1) S_{\beta}(t_2) \dots S_{\omega}(t_n)) \rangle$$

($\alpha, \beta, \dots \omega$ sont les indices cartésiens x, y, z).

1 - 1) Introduction du champ virtuel.

Pour pouvoir développer néanmoins de telles expressions, Abrikosov imagine la méthode suivante :

Pour un spin de longueur S , il introduit $2S + 1$ états d'un champ de fermions "virtuels". Considérons alors l'opérateur :

$$\vec{J} = \sum_{\sigma\sigma'} a_{\sigma}^{\dagger} \vec{S}_{\sigma\sigma'} a_{\sigma},$$
 où les $\vec{S}_{\sigma\sigma'}$ sont les éléments de matrice de $\vec{S}$ sur une base arbitraire et où les β, β' varient de 1 à $2S + 1$. Alors j_x, j_y, j_z vérifient les relations de commutation de l'opérateur moment cinétique ($[j_x, j_y] = ij_z$, etc...), donc $\vec{J}$ est une représentation de l'opérateur moment cinétique $\vec{J}$ dans l'espace de Fock du champ virtuel ; pour avoir $\vec{S}$, c'est à dire une représentation irréductible de $\vec{J}$ dans un espace à $2S + 1$ dimensions, il suffit (par exemple) d'imposer la contrainte "une seule particule virtuelle est présente dans le système". En effet, l'espace de Fock du champ virtuel se réduit à l'espace des états à une seule particule, qui est à $2S + 1$ dimensions. Reste à assurer pratiquement cette contrainte ce qui est obtenu de la façon suivante :

- On associe au champ virtuel un potentiel chimique λ .
- Ayant écrit l'interaction de Kondo sous la forme :

$$H_{\text{int}} = - \frac{J}{N} \sum_{\substack{kk' \\ ss' \\ \sigma\sigma'}} c_{ks}^{\dagger} \vec{\sigma}_{ss'} c_{k's'} a_{\sigma}^{\dagger} \vec{S}_{\sigma\sigma'} a_{\sigma},$$

on peut maintenant développer séparément le numérateur et le dénominateur de la fonction de Green G par les techniques standard, sous forme de diagrammes marqués (c'est à dire où les temps intermédiaires ont des positions relatives fixées). Chacun de ces diagrammes contient la contribution des états à 1, 2, ... $2S + 1$ particules virtuelles, soit :

$$D(\lambda) = D_1(\lambda) + D_2(\lambda) + \dots + D_{2S+1}(\lambda)$$

(Evidemment il n'y a pas de contribution perturbée à 0 particule).

Si l'on fait $\lambda \gg T$, D_1 a un comportement asymptotique en $e^{-\beta\lambda}$, D_2 en $e^{-2\beta\lambda}$, ..., D_{2S+1} en $e^{-(2S+1)\beta\lambda}$. Donc pour isoler la contribution à 1 particule virtuelle, il suffit de prendre :

$$D(0) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} e^{\beta\lambda} D(\lambda)$$

Cette méthode permet de développer en perturbations n'importe quelle fonction de Green à une ou plusieurs particules.

1 - 2) Conséquences de la procédure $\lambda \rightarrow \infty$

La fonction de Green libre pour la particule virtuelle est :

$$G_{\sigma\sigma'}(t - t') = \langle T (a_{\sigma}(t) \bar{a}_{\sigma'}(t')) \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} G_{\lambda}(t - t') =$$

$$\delta_{\sigma\sigma'} (1 - n(\lambda)) Y(t - t') - n(\lambda) Y(t' - t) e^{-\lambda(t - t')}$$

où $n(\lambda)$ est la distribution de Fermi et Y la fonction escalier d'Heaviside. Il en résulte une conséquence très importante : seuls les diagrammes ne contenant qu'une seule boucle virtuelle donnent une limite non nulle lorsque $\lambda \rightarrow \infty$. En effet, dans une boucle, il faut toujours revenir à son point de départ, d'où d'après la forme de G_{λ} , au moins un facteur $n(\lambda)$ par boucle. Et la multiplication par $e^{\beta\lambda}$ ne permet de n'en conserver qu'un seul lors du passage à la limite $\lambda \rightarrow \infty$. Autrement dit, les diagrammes à plusieurs boucles virtuelles concernent nécessairement les états à plusieurs particules virtuelles. Il suffit donc de ne considérer que les diagrammes à une seule boucle virtuelle. Comme ils sont connexes, on peut écrire, pour la partie perturbée ΔG de la fonction de Green :

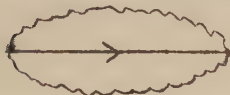
$$(121) \quad \Delta G () = \frac{\langle T (() \mathcal{F}(\beta)) \rangle_{\text{connexe}}}{\langle \mathcal{F}(\beta) \rangle_{\text{connexe}}}$$



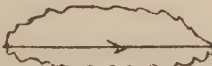
où la connexité est comprise en tenant compte de la ligne virtuelle.

On voit alors bien d'où vient l'oubli fréquent du dénominateur $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_{\text{connexe}}$: à cause de la contrainte "une seule particule virtuelle dans le système", on ne peut plus appliquer le "linked cluster theorem", puisque nous n'avons que des diagrammes connexes en haut et en bas, ce qui a été souligné par Keiter⁽¹⁶⁾.

Après cette parenthèse, revenons à l'équation (121) et passons des diagrammes marqués aux diagrammes muets en supprimant les facteurs $\frac{1}{n!}$ en provenance de l'exponentielle $\mathcal{J}(\beta)$ et en introduisant les coefficients de symétrie habituels. Il y a alors un risque de confusion. Considérons le diagramme



(La ligne ondulée représente la ligne virtuelle, mais attention, elle n'a pas le même sens que dans l'exposé, ^{au chapitre 3} comme nous le verrons en écrivant explicitement les diagrammes. Nous employons le même symbole parce que nous n'avons qu'un nombre limité de lignes à notre disposition).

Donc ce diagramme  est un élément de la self énergie Σ au sens de la topologie des diagrammes. Mais ce n'en est pas un au sens de l'équation de Dyson, car il ne peut pas se combiner avec d'autres du même type. Par exemple, le diagramme



contenant 2 boucles virtuelles, est nul lors de la limite $\lambda \rightarrow \infty$. Nous préférons appeler $\langle \theta \rangle$ l'ensemble des diagrammes à une seule boucle virtuelle de ce type car d'après (121), ils vérifient l'équation

$$\text{Diagram with double line} = \text{Diagram with single line} + \frac{1}{\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle} \text{Diagram with loop } \theta$$

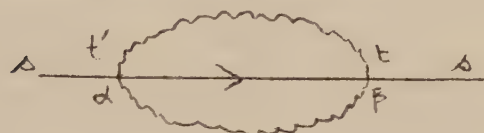
qui est l'expression de G en fonction de la "matrice T " :



$$T = \frac{\langle \theta \rangle}{\langle \mathcal{Y}(\beta) \rangle} = \frac{\langle T \{ (H_{\text{int}}, c_{ks})_t (H_{\text{int}}, \bar{c}_{k's'})_t, \mathcal{Y}(\beta) \} \rangle}{\langle \mathcal{Y}(\beta) \rangle}$$

1 - 3) Ecriture explicite des diagrammes

Donnons quelques exemples :



$$\frac{1}{2S+1} \sum_{\alpha\beta} \langle s | \sigma_\alpha \sigma_\beta | s \rangle \text{Tr } S_\alpha S_\beta \quad \times$$

$$-\left(\frac{-J}{N}\right)^2 g(t-t') G_\lambda(t-t') G_\lambda(t'-t)$$

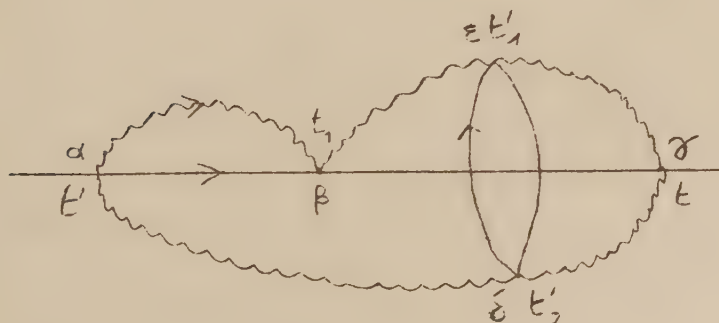
(Le facteur $\frac{1}{2S+1}$ vient du fait que la définition de la valeur moyenne $\langle \quad \rangle$ est

$$\langle \dots \rangle = \frac{\text{Tr } e^{-\beta(H_0 - \mu N)} \dots}{\text{Tr } e^{-\beta(H_0 - \mu N)}}$$

et que l'état non perturbé est dégénéré $(2S+1)$ fois, comme cela a été expliqué au cours de l'exposé)

g est la fonction électronique :

$$g = \sum_k \left[(1 - n(\epsilon_k)) Y(t-t') - n(\epsilon_k) Y(t'-t) \right] e^{-\epsilon_k(t-t')}$$



$$\frac{1}{2S+1} \sum_{\alpha\beta\gamma} \langle s | \sigma_\alpha \sigma_\beta \sigma_\gamma | s \rangle \text{Tr} \sigma_\epsilon \sigma_\delta \text{Tr} S_\alpha S_\beta S_\epsilon S_\gamma S_\delta \times$$

$$\left(\frac{-J}{N}\right)^5 \int_0^\beta dt_1 dt'_1 dt'_2 g(t_1 - t') g(t - t_1) g(t'_1 - t'_2) g(t'_2 - t'_1) \times$$

$$G_\lambda(t_1 - t') G_\lambda(t'_1 - t_1) G_\lambda(t - t'_1) G_\lambda(t'_2 - t) G_\lambda(t' - t'_2)$$

Ces exemples illustrent la règle pour obtenir la valeur $D(\lambda)$ d'un diagramme :

$$D(\lambda) = S(D) \times C(D) \times I(D)$$

Le coefficient de spin $S(D)$ est défini exactement de la même façon que dans l'exposé, au chapitre III. Il en est de même pour le coefficient normal $C(D)$ en remarquant toutefois que la boucle virtuelle fermée (de type fermion) introduit un signe - : elle compte dans le 1 de la formule :

$$C(D) = \left(\frac{-J}{N}\right)^P (-)^{P+1}$$

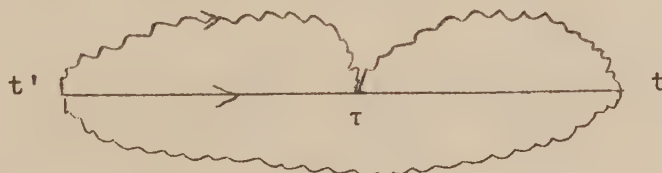
quant à la valeur intégrée $I(D)$, elle semble assez différente :

- il faut associer à la ligne virtuelle le propagateur G_λ
- il faut intégrer librement sur les temps intermédiaires.

Nous allons voir maintenant qu'en prenant la limite $\lambda \rightarrow \infty$ d'un diagramme d'Abrikosov, on retrouve une famille de diagrammes équivalents à B. B. D.

2 - Equivalence avec les diagrammes B. B. D.

Nous allons montrer cette équivalence sur un diagramme très simple parce qu'il sera évident que les explications données peuvent s'appliquer à n'importe quel diagramme. Considérons donc par exemple le diagramme suivant :



contribuant à $\langle \theta \rangle$



Sa valeur intégrée est par définition :

$$I(D) = \int_0^\beta g(\tau - t') g(t - \tau) G_\lambda(\tau - t') G_\lambda(t - \tau) G_\lambda(t' - t)$$

$$\text{avec } G_\lambda(t) = \left[(1 - n_\lambda) Y(t) - n_\lambda Y(-t) \right] e^{-\lambda t},$$

pour t dans l'intervalle $(-\beta, \beta)$.

Si l'on prend t' et t dans l'intervalle $(0, \beta)$, tous les arguments des propagateurs du diagramme sont dans l'intervalle $(-\beta, \beta)$. Il résulte que les exponentielles disparaissent dans la boucle fermée virtuelle. Donc on a :

$$I(D) = \int_0^\beta g(\tau - t') g(t - \tau) \times$$

$$\left[(1 - n_\lambda) Y(\tau - t') - n_\lambda Y(\tau - t) \right] \left[(1 - n_\lambda) Y(t - \tau) - n_\lambda Y(\tau - t) \right] \times$$

$$\left[(1 - n_\lambda) Y(t' - t) - n_\lambda Y(t - t') \right]$$

Maintenant considérons $\lim_{\lambda \rightarrow \infty} e^{\beta\lambda} I(D)$, on voit que tous les facteurs $1 - n_\lambda \rightarrow 1$ tandis qu'on a droit à un seul facteur $-n_\lambda$ pour fermer la boucle virtuelle. On peut donc écrire :

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} e^{\beta\lambda} \text{ (diagramme) } = - \left[\text{diagramme 1} + \text{diagramme 2} + \text{diagramme 3} \right]$$

$$\begin{aligned} \text{où maintenant } & \left. \begin{aligned} & \text{diagramme 1} = Y(t - t') \\ & \text{diagramme 2} = Y(t' - t) \end{aligned} \right\} |t - t'| \in [0, \beta] \end{aligned}$$

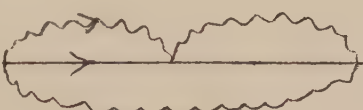
Le signe $-$ provient de $\lim_{\lambda \rightarrow \infty} e^{\beta\lambda} (-n_\lambda) = -1$ et on peut noter qu'on aurait

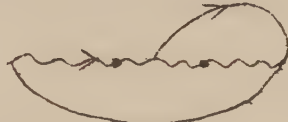
obtenu le même résultat en employant un champ de bosons virtuels, puisqu'on écrit finalement qu'il n'y a qu'une seule particule virtuelle dans le système



on remarque qu'alors les fonctions  sont redondantes et peuvent être supprimées (mais sans oublier d'intégrrer sur les temps d'entrée et de sortie de la ligne ).

On peut alors écrire :

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} e^{\beta \lambda} \left[\text{Diagram 1} \right] = - \left[\text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} \right]$$





On reconnaît alors exactement une famille de diagrammes équivalents B. B. D. qu'avec les notations de l'exposé Chapitre 3, on dessinerait


 $+$

 $+$


(remarquer que le signe - introduit par le passage à la limite s'annule avec le signe - supplémentaire du coefficient normal $C(D)$, provenant du fait qu'avec les diagrammes d'Abrikosov on comptait la boucle virtuelle dans le 1 du $(-)^{p+1}$, ayant introduit un champ de fermions virtuels).

Il est facile de voir de la même façon que tout diagramme d'Abrikosov engendre une famille de diagrammes équivalents B. B. D. lorsqu'on prend la limite $\lambda \rightarrow \infty$.



A N N E X E 2

Elimination partielle des boucles électroniques dans la matrice T

Commençons par bien observer la propriété de factorisation partielle des coefficients de spin, qui est à la base de la démonstration. Soit par exemple le diagramme contribuant à $\langle 0 \rangle$



On voit facilement que son coefficient de spin se factorise partiellement :

$$s \left[\text{diagram} \right] = s \left[\text{diagram}_1 \right] \times s \left[\text{diagram}_2 \right] \times s \left[\text{diagram}_3 \right]$$

En effet, on a bien, d'après la définition des coefficients de spin :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \alpha_5 \\ \alpha_6 \alpha_7 \alpha_8 \alpha_9 \alpha_{10} \\ \alpha' \alpha}} \text{Tr } S_{\alpha'} S_{\alpha_1} S_{\alpha_2} S_{\alpha_3} S_{\alpha_4} S_{\alpha} S_{\alpha_5} S_{\alpha_{10}} S_{\alpha_6} S_{\alpha_7} S_{\alpha_8} S_{\alpha_9} \\ & \quad \times \text{Tr } \sigma_{\alpha_1} \sigma_{\alpha_2} \sigma_{\alpha_4} \sigma_{\alpha_3} \times \text{Tr } \sigma_{\alpha_5} \sigma_{\alpha_6} \times \text{Tr } \sigma_{\alpha_7} \sigma_{\alpha_8} \sigma_{\alpha_9} \times \langle s | \sigma_{\alpha'} \sigma_{\alpha_{10}} \sigma_{\alpha} | s \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha_5 \alpha_{10} \alpha_6 \\ \alpha' \alpha}} \text{Tr } S_{\alpha'} S_{\alpha} S_{\alpha_5} S_{\alpha_{10}} S_{\alpha_6} \times \langle s | \sigma_{\alpha'} \sigma_{\alpha_{10}} \sigma_{\alpha} | s \rangle \times \text{Tr } \sigma_{\alpha_5} \sigma_{\alpha_6} \\ & \times \frac{1}{2} \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4} \text{Tr } S_{\alpha_1} S_{\alpha_2} S_{\alpha_3} S_{\alpha_4} \text{Tr } \sigma_{\alpha_1} \sigma_{\alpha_2} \sigma_{\alpha_4} \sigma_{\alpha_3} \\ & \times \frac{1}{2} \sum_{\alpha_7 \alpha_8 \alpha_9} \text{Tr } S_{\alpha_7} S_{\alpha_8} S_{\alpha_9} \text{Tr } \sigma_{\alpha_7} \sigma_{\alpha_8} \sigma_{\alpha_9} \end{aligned}$$



Il existe donc deux sortes de boucles (ou ensemble de boucles). Les boucles (ou ensemble de boucles) "libres" qui renormalisent la ligne virtuelle, qui contribuent aux divergences en β , et dont le coefficient de spin se factorise. On a d'autre part, les boucles (ou ensemble de boucles) "liées" qui renormalisent les vertex de la ligne électronique extérieure, qui n'introduisent pas de divergences en β et dont le coefficient de spin ne se factorise pas. On peut alors classer l'ensemble $\mathcal{E}$ des diagrammes contribuant à $\langle \theta \rangle$ en une somme de familles

$$\mathcal{E} = F^0 + F^1 + F^2 + \dots + F^N + \dots$$

où F^N est l'ensemble de tous les diagrammes comprenant N boucles. Chaque famille F^N se décompose à son tour en une somme de sous familles :

$$F^N = D_N^0 + D_N^1 + D_N^2 + \dots + D_N^N$$

D_N^0 est l'ensemble des diagrammes de F^N n'ayant aucune boucle (ou ensemble de boucles) liée,, D_N^N est l'ensemble des diagrammes de F^N ayant ses N boucles liées. Par exemple :


 $\in D_3^0$


 $\in D_3^2$


 $\in D_3^2$


 $\in D_3^3$

On peut donc écrire l'ensemble des diagrammes contribuant à $\langle \theta \rangle$ sous la forme d'un

tableau triangulaire :

$$F^0 = D^0_0$$

$$F^1 = D^0_1 + D^1_1$$

$$F^2 = D^0_2 + D^1_2 + D^2_2$$

.....

$$F^N = D^0_N + D^1_N + D^2_N + \dots + D^N_N$$

$$F^{N+1} = D^0_{N+1} + D^1_{N+1} + D^2_{N+1} + \dots + D^N_{N+1} + D^{N+1}_{N+1}$$

.....

Les éléments de la première colonne contiennent les termes les plus divergents : D^0_N contient des divergences en $\beta^N, \beta^{N-1}, \dots, \beta$.

De même D^p_N contient des divergences en $\beta^{N-p}, \dots, \beta$. Les seuls éléments du tableau n'ayant aucune divergence en β sont les termes "complètement liés",

$$D^0_0, D^1_1, D^2_2, \dots, D^N_N, \dots$$

Montrons pour commencer que les éléments de la première colonne peuvent s'écrire :

$D^0_0 + D^0_1 + \dots + D^0_N + \dots = D^0_0 \langle \mathcal{I}(\beta) \rangle + \text{corrections}$, les corrections étant des diagrammes appartenant aux familles du triangle, à l'exception de celles de la première colonne.

En effet, un élément de D^0_2 est par exemple



et tous les éléments de D^0_2 formés à l'aide de ces deux boucles et du même élément vertex  (sans changer la disposition relative des deux boucles) ont le même coefficient de spin. (Diagrammes tels que

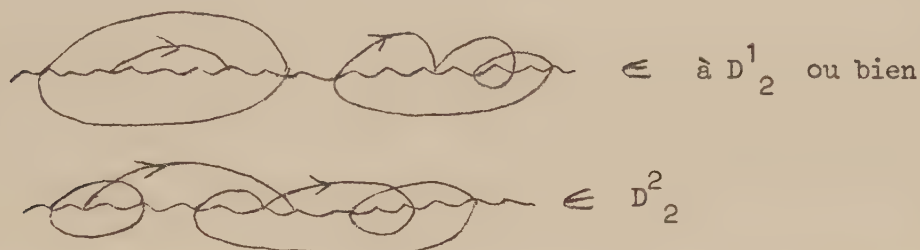




D'autre part, le produit :



est obtenu en donnant aux 2 boucles toutes les positions relatives possibles par rapport aux temps t et t' (sans changer leur position mutuelle). Ce produit ajoute donc à la famille précédente de D_2^0 des diagrammes tels que



(Remarquons bien que pour ces factorisations, on considère évidemment les diagrammes sous leur forme initiale et non pas les valeurs associées aux diagrammes). Comme cette factorisation partielle se produit quel que soit le cas de figure, on peut réécrire notre tableau triangulaire sous la forme :

$$F^0 = D^0_0$$

$$F^1 = D^0 \langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_1 + {}^1D^1_1$$

$$F^2 = D^0 \langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_2 + {}^1D^1_2 + {}^1D^2_2$$

.....

$$F^N = D^0 \langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_N + {}^1D^1_N + {}^1D^2_N + \dots + {}^1D^N_N$$

.....

$\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_N$ est la contribution à $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$ des diagrammes à N boucles.

Quant aux familles ${}^1D^i_j$, elles représentent graphiquement les mêmes diagrammes que les familles D^i_j précédentes, mais elles en diffèrent car il faut effectuer les corrections de coefficient correspondant à la factorisation de la première colonne. La règle pour calculer ce coefficient effectif est la suivante :

- (1) On calcule le coefficient de spin usuel du diagramme, soit $S(D)$.
- (2) On décroche complètement les boucles électroniques de la ligne ouverte (sans les décrocher entre elles) et on calcule le coefficient de spin $S(D')$ de diagramme D' obtenu. Bien remarquer que $S(D')$ est le même quel que soit le diagramme D' choisi pour diagramme "décroché", à cause de la règle de factorisation des coefficients de spin.
- (3) Le coefficient de spin effectif à affecter au diagramme est :

$$S_{\text{eff}}^1(D) = S(D) - S(D')$$

Remarquons tout de suite que ces coefficients $S_{\text{eff}}^1(D)$ vérifient les mêmes relations que les coefficients $S(D)$: si les diagrammes D_1 et D_2 ne diffèrent que par la position d'éléments de self énergie renormalisant la ligne virtuelle on a

$$S_{\text{eff}}^1(D_1) = S_{\text{eff}}^1(D_2)$$

Exemple :

$$S_{\text{eff}}^1 \left[\text{diagramme 1} \right] = S_{\text{eff}}^1 \left[\text{diagramme 2} \right] =$$

$$S \left[\text{diagramme 3} \right]$$

$$- S \left[\text{diagramme 4} \right]$$

On peut maintenant recommencer l'opération et écrire :

$${}^1D_1^1 + {}^1D_2^1 + {}^1D_3^1 + \dots + {}^1D_N^1 + \dots = {}^1D_1^1 \langle \mathcal{J}(\beta) \rangle + \text{corrections,}$$

les corrections étant des diagrammes appartenant aux familles du tableau initial (à l'exclusion des deux premières colonnes) avec des coefficients appropriés. Considérons par exemple un élément de ${}^1D_3^1$, soit pour fixer les idées de diagramme :





D'après la définition des coefficients de spin effectif S^1_{eff} , on voit que tous les autres diagrammes de la famille ${}^1D^1_3$ où les deux boucles 

et  ont d'autres positions relatives par rapport au diagramme

 de ${}^1D^1_1$ (tout en gardant les mêmes positions relatives entre elles) ont le même coefficient de spin effectif S^1_{eff} . On peut donc

écrire la somme de tous les diagrammes de ${}^1D^1_3$ sous la forme :

$$\text{Diagram 1} \times \text{Diagram 2} + \text{corrections,}$$

les corrections étant des diagrammes tels que

$$\text{Diagram 3} \in {}^1D^2_3 \quad \text{ou bien}$$

$$\text{Diagram 4} \in {}^1D^3_3$$

Lorsqu'on aura effectué les corrections de coefficient, ces diagrammes constitueront les ensembles ${}^2D^2_3$ et ${}^2D^3_3$. Voici sur l'exemple du premier des deux diagrammes "de correction" que nous venons d'obtenir, la façon de calculer son coefficient de spin effectif $S^2(\text{eff})$

(1) On calcule son coefficient effectif de type 1, soit :

$$S^1_{\text{eff}} \left[\text{Diagram 5} \right]$$

qui compense les corrections introduites pour factoriser la première colonne du tableau .

(2) On compense ensuite les corrections introduites pour factoriser la deuxième colonne du tableau. Il faut bien voir qu'elles peuvent provenir de 2 familles de ${}^1D^1_3$ différentes.



(a) La famille de  que nous venons d'étudier

(b) la famille des diagrammes tels que



d'où les corrections et finalement le coefficient de spin effectif de type 2.

$$S_{\text{eff}}^2 \left[\text{diagram with 3 loops} \right] =$$

$$S_{\text{eff}}^1 \left[\text{diagram with 3 loops} \right]$$

$$- S_{\text{eff}}^1 \left[\text{diagram with 3 loops} \right]$$

$$- S_{\text{eff}}^1 \left[\text{diagram with 3 loops} \right]$$

D'une façon générale, le coefficient effectif S_{eff}^2 d'un élément de la forme ${}^2D_N^p$ s'écrit :

$$S_{\text{eff}}^2({}^2D_N^p) = S_{\text{eff}}^1({}^2D_N^p) - \sum_i S_{\text{eff}}^1({}^2\Delta_{N,i}^p)$$

où les diagrammes ${}^2\Delta_{N,i}^p$ sont les diagrammes à nombre de boucles liées $p' < p$ susceptibles de former l'élément considéré de ${}^2D_N^p$ lorsqu'on fait glisser ses boucles libres. Il est clair que les coefficients S_{eff}^2 ont la même propriété que les coefficients S_{eff}^1 : si les diagrammes D_1 et D_2 ne diffèrent que par la position d'éléments de self-énergie renormalisant la ligne virtuelle on a :

$$S_{\text{eff}}^2(D_1) = S_{\text{eff}}^2(D_2)$$



Exemple :

$$S_{\text{eff}}^2 \left[\text{diagram 1} \right] = S_{\text{eff}}^2 \left[\text{diagram 2} \right]$$

$$= S_{\text{eff}}^2 \left[\text{diagram 3} \right] = S_{\text{eff}}^2 \left[\text{diagram 4} \right]$$

Remarquons que la définition de S_{eff}^2 conserve la propriété de factorisation des coefficients. On peut alors recommencer la même opération "factorisation + corrections" et réécrire notre tableau sous la forme

$$F^0 = D^0_0$$

$$F^1 = D^0_0 \langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_1 + {}^1D^1_1$$

$$F^2 = D^0_0 \langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_2 + {}^1D^1_1 \langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_1 + {}^2D^2_2$$

.....

$$F^N = D^0_0 \langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_N + {}^1D^1_1 \langle \mathcal{J}(\beta) \rangle_{N-1} + {}^2D^2_N + \dots + {}^2D^N_N$$

.....

A cause de la propriété vérifiée par les coefficients de spin effectifs $S^1_{\text{eff}}, S^2_{\text{eff}}, \dots$, on peut poursuivre le raisonnement de proche en proche, définissant des coefficients effectifs $S^3_{\text{eff}}, \dots, S^N_{\text{eff}}$, s'appliquant à des familles ${}^3D^p_q, \dots, {}^ND^p_q, \dots$

Finalement, le dénominateur $\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle$ se simplifie et on a seulement :

$$T = D^0_0 + {}^1D^1_1 + {}^2D^2_2 + \dots + {}^ND^N_N + \dots$$

Pour avoir le coefficient des diagrammes de la famille ${}^ND^N_N$, il faut en principe calculer successivement :

$$S^1_{\text{eff}}({}^ND^N_N) \quad S^2_{\text{eff}}({}^ND^N_N) \quad \dots \quad S^N_{\text{eff}}({}^ND^N_N)$$



ce qui n'est guère pratique. Il serait donc souhaitable d'améliorer le calcul des coefficients effectifs.

Exponentialisation de $\langle \mathcal{I}(\beta) \rangle$

Nous allons dans cette démonstration faire glisser les boucles entre elles, contrairement au cas précédent où on les faisait glisser seulement par rapport à la ligne électronique extérieure, tout en laissant leurs positions relatives inchangées. La démonstration est basée sur deux propriétés :

- La factorisation des coefficients de spin des parties de diagrammes situés en position de renormalisation de la ligne droite (que nous avons vu précédemment).

- La présence de coefficients de symétrie. Ainsi, à partir du diagramme



on peut considérer la famille obtenue en donnant aux différentes boucles

( et ) ou ensembles de boucles liées

() toutes les positions relatives possibles (sans changer les positions relatives à l'intérieur d'un ensemble de boucles). La somme des diagrammes de la famille ne sera pas égale à

$$\text{mais à } \text{diagramme} \times \frac{1}{2!} \left[\text{diagramme} \right]^2 \times \frac{1}{3!} \left[\text{diagramme} \right]^3$$

pour tenir compte des diagrammes identiques obtenus lorsqu'on donne aux boucles ou ensemble de boucles liées toutes les positions relatives possibles. C'est évidemment la présence de ces factorielles qui donne naissance à la formule exponentielle.



Classification des diagrammes de $\langle \mathcal{Y}(\beta) \rangle$

Il nous faut maintenant classer les diagrammes de $\langle \mathcal{Y}(\beta) \rangle$ en différentes familles F^N , de façon à pouvoir factoriser une famille F^N en n' introduisant que des corrections concernant les familles d'ordre supérieur $F^{N+1}, F^{N+2}, \dots$ etc. Pour cela nous écrivons l'ensemble $\mathcal{E}$ des diagrammes contribuant à $\langle \mathcal{Y}(\beta) \rangle$ sous la forme symbolique :

$$\mathcal{E} = \sum_{p_i, q_i} \prod_i (\Sigma_{p_i})^{q_i}$$

Les Σ_{p_i} représentent l'ensemble des diagrammes à p_i boucles, dont aucune des p_i boucles n'est placée en position de renormalisation de la ligne virtuelle (ni non plus aucun sous ensemble à $p'_i < p_i$ boucles)

Exemples :

 $\in \Sigma_3$

 $\notin \Sigma_3$

 $\notin \Sigma_4$

Attention : Ne pas confondre avec les diagrammes verticalement connexes introduits par d'autres auteurs.

Quant à la notation $\sum_{p_i, q_i} \prod_i (\Sigma_{p_i})^{q_i}$ elle représente l'ensemble des

diagrammes formés avec :

q_1 diagrammes Σ_{p_1}

q_2 diagrammes Σ_{p_2}

.....

q_N diagrammes Σ_{p_N}

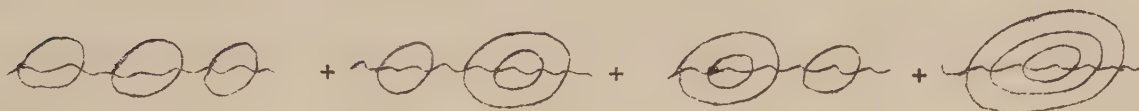
.....

étant bien entendu qu'on ne donne aux diagrammes $\Sigma_{p_1}, \Sigma_{p_2}, \dots, \Sigma_{p_N}, \dots$

que des positions où ils renormalisent la ligne virtuelle (c'est à dire des positions où leur coefficient de spin se factorise).

Exemple :

$$\prod [\text{diagram}]^3 =$$



mais ne contient pas de diagrammes tels que  qui sera pris en compte par un produit symbolique de la forme

$$\prod [\text{diagram}] [\text{diagram}]$$

On décrit bien ainsi tout l'ensemble $\mathcal{E}$. Bien noter que le symbole $\prod$ désigne l'ensemble des diagrammes différents formés de la façon indiquée et n'introduit donc aucune duplication.

La classe la plus simple de $\mathcal{E}$ est celle qui n'a aucune boucle liée. Elle s'écrit :

$$F^0 = \sum_{\substack{p_i = 1 \\ q_i}} \prod_i (\sum p_i)^{q_i}$$

Vient ensuite F^1 qui n'a qu'une boucle liée et s'écrit :

$$F^1 = \sum_{p_i, q_i} \prod_i (\sum p_i)^{q_i}$$

avec la contrainte : "Tous les p_i valent 1 sauf l'un d'entre eux qui vaut 2"

Ensuite on a F^2 (2 boucles liées) pour laquelle on a deux contraintes possibles :

" Tous les p_i valent 1 sauf l'un d'entre eux qui vaut 3"

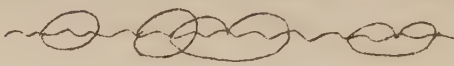
" Tous les p_i valent 1 sauf deux d'entre eux qui valent 2"

Voici par exemple 2 diagrammes de F^2 avec ces deux contraintes :



On peut définir de la même façon $F^3, \dots, F^N, \dots$ mais évidemment les contraintes possibles sur les p_i sont de plus en plus nombreuses.

Passons aux factorisations : on peut écrire, en faisant glisser entre elles toutes les boucles de F^0 : $F^0 = \exp(\Sigma_1) + \text{corrections}$, les corrections étant de la forme $F^1, F^2, \dots, F^N, \dots$ et définissant un coefficient de spin effectif $S_{\text{eff}}^1(D)$ pour ces diagrammes, exactement comme précédemment. Pour éviter les confusions, on note alors ces familles ${}^1F^1, {}^1F^2, \dots, {}^1F^N, \dots$ l'indice 1 indiquant qu'il faut comprendre les diagrammes de ces familles avec les coefficients de spin effectif S_{eff}^1 .

Ensuite on peut faire la même chose pour ${}^1F^1$, parce que les coefficients de spin S_{eff}^1 jouissent des mêmes propriétés de factorisation. Rappelons que les diagrammes de ${}^1F^1$ sont de la forme ,

c'est à dire comprennent 2 boucles liées ensemble et un nombre indéterminé de boucles libres. On fait alors glisser toutes ces boucles sans changer la position relative des 2 boucles liées. On obtient alors la factorisation

${}^1F^1 = {}^1\Sigma_2 \exp(\Sigma_1) + \text{corrections}$, les corrections étant des diagrammes des familles $F^2, F^3, \dots, F^N, \dots$ et définissant un coefficient de spin effectif S_{eff}^2 , d'où la notation ${}^2F^2, {}^2F^3, \dots, {}^2F^N, \dots$.

En recommençant pour ${}^2F^2$, il vient alors ${}^2F^2 = {}^2\Sigma_3 \exp(\Sigma_1) + \frac{1}{2!} ({}^1\Sigma_2) \exp(\Sigma_1) + \text{corrections}$. Les notations ${}^1\Sigma_2, {}^2\Sigma_3, \dots$ etc. indiquent les diagrammes de topologie Σ_2 ou Σ_3 mais calculés avec le coefficient de spin effectif $S_{\text{eff}}^1, S_{\text{eff}}^2, \dots$.

On peut recommencer indéfiniment l'opération et on obtient:

$$\langle \mathcal{J}(\beta) \rangle = \exp({}^0\Sigma_1 + {}^1\Sigma_2 + {}^2\Sigma_3 + \dots + {}^{N-1}\Sigma_N + \dots)$$

Par suite de la factorisation des coefficients de spin, les coefficients de spin effectifs nécessaires au calcul de ${}^1\Sigma_2, {}^2\Sigma_3$, etc... sont définis exactement de la même façon que précédemment.



A N N E X E 3

Calcul de T_{boucle}^4 =====

On a vu dans l'exposé que pour $t' < t$

$$T_{\text{boucle}}^4(t - t') = -30 \left[\text{diagram 1} + \text{diagram 2} \right]$$

Le coefficient -30 est le coefficient de spin effectif S_{eff}^1 .

La transformée de Fourier de T_{boucle}^4 est

$$T_{\text{boucle}}^4(i\omega) = -30 \text{ [diagram]}$$

qu'on calcule à l'aide des valeurs associées :

$$T_{\text{boucle}}^4(i\omega) = -30 \left(\frac{i}{N}\right)^4 \sum_{xyz}$$

$$\Delta \left[\text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} \right]$$

La valeur intégrée de cette famille F de 4 diagrammes équivalents est donc

$$\begin{aligned} I(F) = & \sum_{xyz} \frac{(1 - n_x)(1 - n_y)(-n_z)}{(x + i\xi - i\omega)(x + y - z - i\omega + i(\xi + \eta - \zeta))(y - z + i(\eta - \zeta))} \\ & + \frac{(1 - n_y)n_x n_z}{(y - z + i(\eta - \zeta))(y - z + i\omega - x + i(\eta - \zeta - \xi))(i\omega - x - i\xi)} \\ & + \frac{(1 - n_z)n_x n_y}{(i\omega - x - i\xi)(i\omega - x + z - y + i(-\xi + \zeta - \eta))(z - y + i(\zeta - \eta))} \\ & + \frac{(1 - n_z)(1 - n_x)(-n_y)}{(z - y + i(\zeta - \eta))(z - y + x - i\omega + i(\zeta - \eta + \xi))(x - i\omega + i\xi)} \end{aligned}$$



Les parties imaginaires $i\xi$, $i\eta$, $i\zeta$ de x , y , z servent à la régularisation.

On peut tout de suite faire $\xi = 0$ car dans les dénominateurs on a toujours $i\omega$ en même temps que $i\xi$. Compte tenu de la symétrie de l'intégration

$$\begin{aligned}
 I(F) = & \sum_{xyz} (1 - n_x) (1 - n_y) (-n_z) \left(\frac{1}{x - i\omega} - \frac{1}{x - i\omega + y - z + i(\eta - \zeta)} \right) \times \\
 & \left(\left(\frac{1}{y - z + i(\eta - \zeta)} \right)^2 + \left(\frac{1}{y - z - i(\eta - \zeta)} \right)^2 \right) \\
 & + (1 - n_y) n_x n_z \left(\frac{1}{i\omega - x} - \frac{1}{i\omega - x + y - z + i(\eta - \zeta)} \right) \times \\
 & \left(\left(\frac{1}{y - z + i(\eta - \zeta)} \right)^2 + \left(\frac{1}{y - z + i(\eta - \zeta)} \right)^2 \right)
 \end{aligned}$$

En posant $\eta = \epsilon/2$, $\zeta = -\epsilon/2$ et en gardant que les parties imaginaires significatives :

$$\begin{aligned}
 I(F) = & \sum \frac{1}{x - i\omega} \sum_{yz} (1 - n_y) (-n_z) \left(\left(\frac{1}{y - z + i\epsilon} \right)^2 + \left(\frac{1}{y - z - i\epsilon} \right)^2 \right) \\
 & + \sum_{xyz} \frac{(1 - n_x)(1 - n_y) n_z + n_x n_y (1 - n_z)}{x - i\omega + y - z} \times \left(\left(\frac{1}{y - z + i\epsilon} \right)^2 + \left(\frac{1}{y - z - i\epsilon} \right)^2 \right) \\
 = & A + B
 \end{aligned}$$

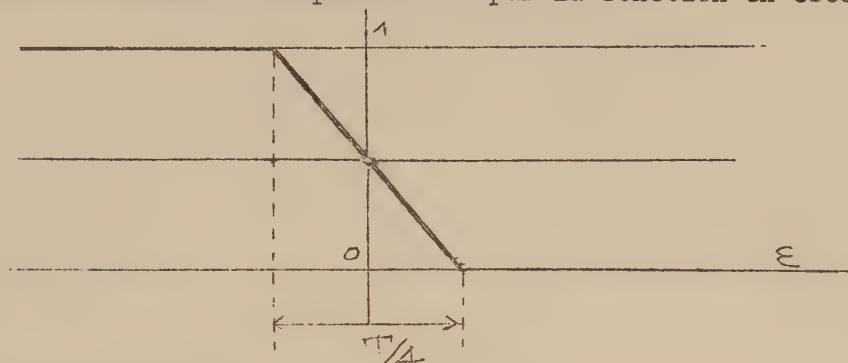
On voit que la régularisation permet d'avoir affaire aux distributions

$$P_f \left(\frac{1}{y - z} \right)^2 = \frac{1}{2} \left(\left(\frac{1}{y - z + i\epsilon} \right)^2 + \left(\frac{1}{y - z - i\epsilon} \right)^2 \right)$$



plutôt qu'à ^l fonction non intégrable $(\frac{1}{y-z})^2$.

Pour pouvoir intégrer de façon approchée l'expression de $I(F)$, nous remplaçons la distribution de Fermi à température T par la fonction en escalier oblique :



C'est à dire que nous faisons l'approximation

$$n(x) \approx \begin{cases} 1 & \text{pour } x < -\frac{T}{8} \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{4x}{T}\right) & \text{pour } -\frac{T}{8} < x < \frac{T}{8} \\ 0 & \text{pour } x > \frac{T}{8} \end{cases}$$

On trouve alors que le deuxième terme de $I(F)$ a un comportement régulier pour $\omega \rightarrow 0$, $T \rightarrow 0$. Finalement, seul le premier terme de $I(F)$ diverge pour $T \rightarrow 0$ et on trouve :

$$T^4_{\text{boucle}}(i\omega) \underset{T \rightarrow 0}{\sim} -60 \times \int \frac{1}{x} \frac{1}{x - i\omega} \times j^4 \rho^2 \log \frac{T}{D}$$



A N N E X E 4

Conditions aux limites et parité.

1 - Relation entre la symétrie fermion ou boson (F ou B), la parité P et la petite parité p.

Considérons une fonction $f(t)$ de symétrie fermion, c'est à dire qu'on a

$$(11) \quad f(\beta - t) = -f(t).$$

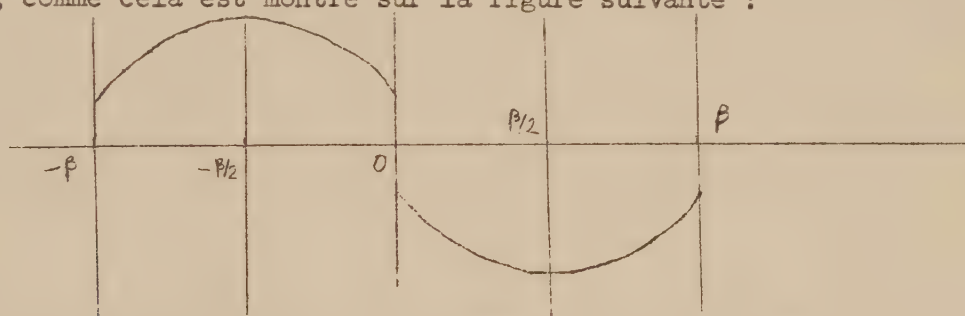
Supposons que cette fonction soit impaire :

$$(12) \quad f(t) = -f(-t)$$

Il résulte des relations (11) et (12), la relation :

$$(13) \quad f\left(\frac{\beta}{2} + t\right) = -f\left(\frac{\beta}{2} - t\right)$$

c'est à dire que la fonction f a une symétrie sur l'intervalle $(0, \beta)$ autour du point $\frac{\beta}{2}$, comme cela est montré sur la figure suivante :



Nous dirons que cette fonction a une symétrie fermion F, une parité $P = -1$ et une petite parité $p = +1$.

Réciproquement, si une fonction f a une parité $P = -1$ et une petite parité $p = 1$, elle a automatiquement une symétrie fermion. On peut résumer les relations entre ces 3 sortes de symétrie par le tableau suivant :

p	+	-	+	-
P	+	-	-	+
G	B	B	F	F

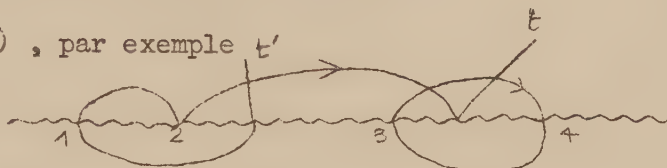
indiquant par exemple qu'une fonction boson impaire a une petite parité impaire, ou qu'une fonction paire, de petite parité impaire, a une symétrie fermion.



Pour exploiter cette propriété dans la recherche de conditions de symétrie pour θ^1 , il nous faut maintenant montrer qu'avec une bande symétrique autour du niveau de Fermi θ et θ^1 ont une parité P bien déterminée.

2-Parité P de θ et θ^1 pour une bande symétrique.

Considérons un diagramme de $\ominus$, par exemple t'



Son coefficient de spin généralisé est

$$\sum_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha', \alpha_3 \alpha \alpha_4} S_{\alpha_1} S_{\alpha_2} S_{\alpha'} S_{\alpha_3} S_{\alpha} S_{\alpha_4} \text{Tr } \sigma_{\alpha_3} \sigma_{\alpha_4} \langle s | \sigma_{\alpha'} \sigma_{\alpha_1} \sigma_{\alpha_2} \sigma_{\alpha} | s' \rangle$$

Considérons maintenant le diagramme issu du précédent en renversant le sens de la ligne électronique :



Son coefficient de spin est

$$\sum_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha', \alpha_3 \alpha \alpha_4} S_{\alpha_1} S_{\alpha_2} S_{\alpha'} S_{\alpha_3} S_{\alpha} S_{\alpha_4} \text{Tr } \sigma_{\alpha_3} \sigma_{\alpha_4} \langle s | \sigma_{\alpha} \sigma_{\alpha_2} \sigma_{\alpha_1} \sigma_{\alpha'} | s' \rangle$$

Il ne diffère du précédent que par le renversement du produit des matrices de Pauli associées à la ligne électronique ouverte.

Nous allons étudier les propriétés d'un tel renversement dans le "Lemme de renversement". Cela nous permettra ensuite de montrer que θ et θ^1 ont des parités déterminées.

Lemme de renversement :

Considérons un produit de N matrices de Pauli, soit $A = \sigma_{\alpha} \sigma_{\beta} \dots \sigma_{\omega}$

$\overline{N}$

Considérons également le produit renversé $B = \sigma_{\omega} \dots \sigma_{\beta} \sigma_{\alpha}$. Ces deux produits



sont soit scalaires, soit vectoriels selon la séquence $\alpha, \beta, \dots \omega$. Alors si la séquence est scalaire, on a :

$$B_{\text{scalaire}} = (-)^N A_{\text{scalaire}} \text{ et si elle est vectorielle :}$$

$$B_{\alpha, \text{vecteur}} = (-)^{N-1} A_{\alpha, \text{vecteur}}$$

c'est à dire que le comportement par renversement de l'ordre des facteurs ne dépend que de N et du caractère scalaire ou vectoriel de la séquence. Ce qui nous intéressera dans le résultat est que pour un même N , le comportement d'une séquence scalaire est toujours opposé à celui d'une séquence vectorielle.

Démonstration par récurrence.

$$\text{Pour } N = 2, \text{ on a :} \quad B_{\text{scalaire}}^2 = A_{\text{scalaire}}^2$$

$$B_{\text{vecteur}}^2 = - B_{\text{vecteur}}^2$$

Supposons la propriété vraie à l'ordre N , soit

$$B_{\alpha, \text{vecteur}}^N = (-)^{N-1} A_{\alpha, \text{vecteur}}^N$$

Le scalaire d'ordre $N + 1$ le plus général est de la forme :

$$A_{\text{scalaire}}^{N+1} = \sigma_{\alpha} A_{\alpha, \text{vecteur}}^N \text{ qui donne par renversement :}$$

$$B_{\text{scalaire}}^{N+1} = B_{\alpha, \text{vecteur}}^N \sigma_{\alpha} = (-)^{N-1} A_{\alpha, \text{vecteur}}^N$$

$$= (-)^{N-1} \sigma_{\alpha} A_{\alpha, \text{vecteur}}^N = (-)^{N+1} A_{\text{scalaire}}^{N+1}$$

De la même façon, le vecteur d'ordre $N + 1$ le plus général est soit de la forme $A_{\alpha, \text{vecteur}}^{N+1} = \sigma_{\alpha} A_{\text{scalaire}}^N$, soit de la forme :

$$A_{\alpha, \text{vecteur}}^{N+1} = \sigma_{\beta} A_{\gamma, \text{vecteur}}^N$$

et on démontre de même que :

$$B_{\alpha, \text{vecteur}}^{N+1} = (-)^N A_{\alpha, \text{vecteur}}^{N+1}$$



Conséquence :

Si on suppose la bande symétrique autour du niveau de Fermi le propagateur électronique $g(t)$ est alors une fonction impaire : $g(t) = -g(-t)$. On voit alors facilement, à l'aide du lemme de renversement que θ (où la séquence des matrices de Pauli associées à la ligne électronique ouverte est nécessairement scalaire) est une fonction impaire :

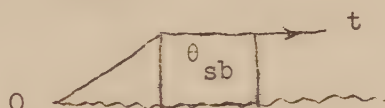
$$\theta(t) = -\theta(-t).$$

De même θ^1 est une fonction paire :

$$\theta^1(t, t') = \theta^1(t', t)$$

3°) Symétrie fermion ou boson des termes contribuant à θ^1 .

Considérons le terme



Il s'agit de la prolonger pour $t < 0$ et on a tout de suite la condition de symétrie précédente $\theta^1(t) = \theta^1(-t)$. Montrons alors que ce terme a une petite parité impaire. Il vaut :

$$\int_0^\beta g(\tau) \theta_{sb}(t - \tau) d\tau = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} g(\beta/2 + u) \theta_{sb}(\theta - u) du$$

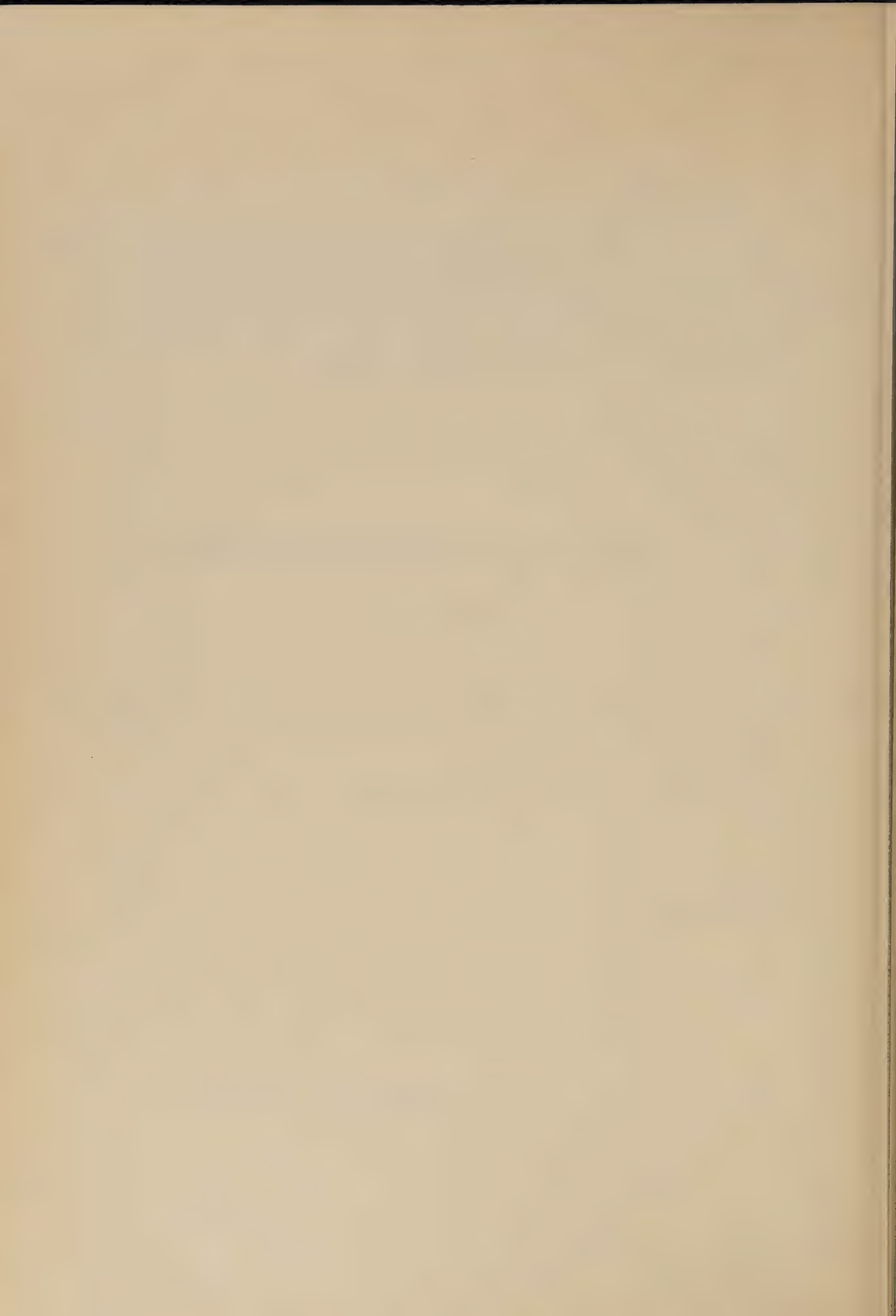
$$\text{avec } t = \theta + \beta/2$$

En posant $g(\beta/2 + u) = \gamma(u)$ on a

$$\phi(\theta) = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} \gamma(u) \theta_{sb}(\theta - u) du$$

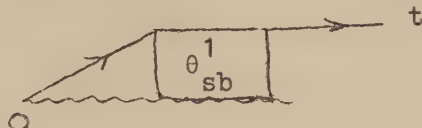
$$\phi(-\theta) = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} \gamma(u) \theta_{sb}(-\theta - u) du = - \int_{-\beta/2}^{\beta/2} \gamma(u) \theta_{sb}(\theta + u) du$$

$$= \int_{\beta/2}^{\beta/2} \gamma(u) \theta_{sb}(\theta - u) du = \phi(\theta) \quad \text{c. q. f. d.}$$



Donc ce terme a bien la symétrie fermion (plus facile à manipuler dans les diagrammes).

On verrait de même que l'autre terme



a une petite parité impaire, donc est de symétrie boson, compte tenu de sa parité P paire.



REFERENCES

- 1) W. Meissner and G. Voigt : Ann. Physik, 7, 761 et 892 (1930)
- 2) J. Kondo : Progr. Theoret. Phys., 32, 37 (1964)
- 3) J. Friedel : Advances in Phys. (Phil. Mag. Suppl.), 3, 446 (1954)
 Nuovo Cimento Suppl., 7, 287 (1958)
- A. Blandin et J. Friedel : J. Phys. Radium, 20, 160 (1959)
- A. Blandin : J. Appl., Phys., 39, 1285
- 4) J. R. Schrieffer and P. A. Wolff : Phys. Rev., 149, 491 (1966)
- 5) B. Coqblin et C. F. Ratto : Phys. Rev. Lett., 21, 1065 (1968)
- 6) A. A. Abrikosov : Physics, 2, 5 (1965)
- 7) B. Roulet, J. Gavoret and P. Nozières : Phys. Rev., 178, 1072 (1969)
- 8) Y. Nagaoka : Phys. Rev., 138, A 1112 (1965)
- 9) P. E. Bloomfield et D. R. Hamann : Phys. Rev., 164, 856 (1967)
- 10) J. Zittartz and E. Müller Hartmann : Z. Physik, 212, 380 (1968)
- 11) J. Zittartz : Z. Physik, 217, 155, (1968)
- 12) H. Suhl : Physics, 2, 39 (1965)
 H. Suhl : Phys. Rev., 141, 483 (1966)
- 13) H. Suhl et D. Wong : Physics, 3, 17 (1967)
- 14) J. Zittartz : Z. Physic, 217, 43 (1968)
- 15) S. D. Silverstein et C. B. Duke : Phys. Rev., 161, 456 (1967)
- 16) H. Keiter : Z. Physik, 213, 466 et 214, 22 (1968)
- 17) A. Theumann : Physics Letters, 33A, 204 (1970)
- 18) C. B. Duke et S. D. Silverstein : Phys. Rev., 161, 470 (1967)
- 19) S. Doniach : Phys. Rev., 144, 382 (1966)
- 20) F. Takeno et T. Ogawa : Progr. Theoret. Phys., 35, 343 (1966)
- 21) Y. Kurata : Progr. Theoret. Phys., 43, 621 (1970)
- 22) K. Yosida : Phys. Rev., 147, 223 (1966)
 et Progr. Theoret. Phys., 36, 875 (1966)
- 23) J. Appelbaum et J. Kondo : Phys. Rev., 170, 542 (1968)
- 24) P. W. Anderson : Phys. Rev., 164, 352 (1967)
 et Phys. Rev. Letters, 18, 1049 (1967)



- 25) V. J. Emery et A. Luther : Phys. Rev. Letters, 26, 1547 (1971)
- 26) C. Bloch et C. de Dominicis : Nuclear Physics, 7, 459 (1958)
- 27) C. Bloch et C de Dominicis : Nuclear Physics, 10, 181 (1959)
- 28) R. Balian et C de Dominicis : Nuclear Physics, 16, 502 (1960)
- 29) J. Goldstone : Proc. Roy. Soc., A 239, 267 (1957)
- 30) N. M. Hugenholtz : Physica, 23, 481 (1957)
- 31) C. Bloch : Nuclear Physics, 7, 451 (1958)
- 32) R. Balian et C de Dominicis : Annals of Physics, 62, 229, (1971)
- 33) C. de Dominicis et G. Toulouse : Physica, 47, 565 (1970)

- 25) J. J. Smith et al. *Journal of the Royal Society of Medicine*, 1971 (1971)
- 26) G. Smith et al. *Journal of the Royal Society of Medicine*, 1972 (1972)
- 27) G. Smith et al. *Journal of the Royal Society of Medicine*, 1973 (1973)
- 28) G. Smith et al. *Journal of the Royal Society of Medicine*, 1974 (1974)
- 29) J. J. Smith et al. *Journal of the Royal Society of Medicine*, 1975 (1975)
- 30) G. Smith et al. *Journal of the Royal Society of Medicine*, 1976 (1976)
- 31) G. Smith et al. *Journal of the Royal Society of Medicine*, 1977 (1977)
- 32) G. Smith et al. *Journal of the Royal Society of Medicine*, 1978 (1978)
- 33) G. Smith et al. *Journal of the Royal Society of Medicine*, 1979 (1979)
- 34) G. Smith et al. *Journal of the Royal Society of Medicine*, 1980 (1980)

